



Etude des écoulements gazeux isothermes en microconduit : du régime hydrodynamique au proche régime moléculaire libre

Timothée Ewart

► To cite this version:

Timothée Ewart. Etude des écoulements gazeux isothermes en microconduit : du régime hydrodynamique au proche régime moléculaire libre. Analyse de données, Statistiques et Probabilités [physics.data-an]. Université de Provence - Aix-Marseille I, 2007. Français. NNT : . tel-00396378

HAL Id: tel-00396378

<https://theses.hal.science/tel-00396378>

Submitted on 17 Jun 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Etude des écoulements gazeux isothermes en microconduits : du régime hydrodynamique au proche régime moléculaire libre



Timothée Ewart

École polytechnique Universitaire de Marseille
IUSTI-UMR-CNRS-6595

Université de Provence

Thèse présentée le 21 septembre 2007 en vue de l'obtention du grade de
Docteur en mécanique énergétique

Le jury est composé de :

Stéphane Colin (rapporteur - INSA Toulouse)
Jean-Claude Lengrand (rapporteur - ICARE Orléans)
Irina Graur (Université de Provence)
Dimitris Valougeorgis (University of Thessaly)
David Zeitoun (Université de Provence)
J. Gilbert Méolans (directeur de thèse - Université de Provence)

Table des matières

Remerciements	6
Introduction	9
1 Dispositifs expérimentaux	13
1.1 Historique des mesures du débit massique	13
1.1.1 Méthode de mesure à pression constante	13
1.1.2 Méthode de mesure à volume constant	14
1.1.3 Méthode de mesure développée dans ce travail de thèse	14
1.2 Description du dispositif expérimental et méthodologie de la mesure . .	14
1.2.1 Microdispositifs	16
1.2.2 Étanchéité du système	18
1.2.3 Méthode de mesure dite de la variation de la pression (volume constant)	19
1.2.4 Méthode de mesure dite de la goutte (pression constante)	21
1.2.5 Avantages et inconvénients des deux méthodes de mesure	24
2 Modélisation : état de l’art et objectifs	27
2.1 Introduction	27
2.2 Régime hydrodynamique et régime de glissement	28
2.2.1 Modélisation analytique approchée	28
2.2.2 Expressions du débit massique	33
2.3 Régime transitionnel	34
2.3.1 Débits massiques	35
2.4 Régime moléculaire libre	37
3 Monte Carlo	39
3.1 Direct Simulation Monte Carlo	39
3.1.1 Réflexions sur la méthode DSMC	39
3.1.2 Objectif de la simulation	41
3.2 DSMC et programmation orientée objet	41
3.2.1 Les particules tests	42
3.2.2 Les parois	42

TABLE DES MATIÈRES

3.2.3	Les cellules	43
3.2.4	Les sous cellules	43
3.2.5	La classe de simulation	43
3.3	Problèmes liés à la mise en oeuvre du programme	44
3.3.1	Utilisation de pointeurs	44
3.3.2	Tableaux ou listes	45
3.3.3	Calcul parallèle	46
3.4	Principes et algorithmes d'une simulation Monte Carlo	46
3.4.1	Initialisation	47
3.4.2	Mouvements et rebonds de la particule sur un pas temps	48
3.4.3	Physique des rebonds : interaction particule/paroi	49
3.4.4	Collision avec la méthode NTC «no time counter»	51
3.5	Spécificité de notre simulation	52
3.5.1	Réservoirs d'entrée et de sortie	53
3.5.2	Fonction zoom	53
3.5.3	Optimisation de la parallélisation	54
3.6	Grandeurs macroscopiques. Valeurs moyennes cumulées	56
3.6.1	Calcul du débit massique	57
3.6.2	Calcul de la pression	58
3.6.3	Calcul de la vitesse	58
3.7	Validation	58
3.7.1	Similitude	58
3.7.2	Tests de validation	59
3.7.3	Conclusion	63
4	Résultats dans les microtubes	65
4.1	Régime de glissement en microtubes	65
4.1.1	Tube de $25\ \mu m$	66
4.1.2	Tube de $50\ \mu m$	77
4.1.3	Tube de $75\ \mu m$	82
4.2	Régime transitionnel et moléculaire libre en microtubes ($D = 50\ \mu m$)	87
5	Résultats dans les microcanaux	91
5.1	Régime de glissement pour le microcanal expérimental	91
5.1.1	Représentation polynomiale du 1^{er} et 2^{nd} degré	92
5.1.2	Effet du premier ordre dans le régime de glissement	96
5.1.3	Effet du second ordre en régime de glissement ou modélisation quadratique du débit $Kn_m \in [0 - 0.7]$?	97
5.2	Régime transitionnel et moléculaire libre	98
5.3	Régime de glissement pour le microcanal «numérique» : DSMC	103
5.3.1	Canal de $9.38\ \mu m \times 492\ \mu m \times 1\ mm$: similitude	103
5.3.2	Profils de vitesses en régime de glissement	103
5.3.3	Régime transitionnel et moléculaire libre	106

TABLE DES MATIÈRES

Conclusions et perspectives	109
A Densité de probabilité et fonction de répartition	115
B Publications	119
Bibliographie	159

Remerciements

Je remercie tout d'abord les quatre chefs : J. G. Méolans (grand chef, encadrant et correcteur très assidu), Irina Graour ou Graur (chef de codirection et scribe), Pierre (chef clé à molette d'une sérénité absolue) et Jean-Luc (chef code, spécialiste des conteneurs qui n'inversent pas l'ordre des points). Je remercie ensuite D. Zeitoun et R. Martin sans qui le financement de ma thèse n'aurait pas été possible.

Toutes mes pensées vont ensuite à mes compagnons d'aventure et de la savane. Jean-Philippe dit la hyène (spécialiste mousse, barbecue et capitaine), Malika dite princesse des sables (spécialiste du sable et imperturbable) et Nicolas dit le chacal (spécialiste brandon, chauffeur attitré et compagnon du bureau). Je remercie tous les autres thésards pour leur bonne humeur quotidienne : Christian, Aurika, Daniel et Florent. Des pensées amicales vont aussi à tous les autres membres du laboratoire : chercheurs (Jérôme (spécialiste OpenGL), Babette, Marie-Claude, Z, ...), étudiants (thésards de 1^{er} et 2nd année), compagnons du bureau (Kokou Doc, Yann, Gilles), et les autres. Je remercie ensuite les informaticiens, spécialistes des batch, shell et du cron : Yann (makefile fluent) et R. Occelli (C, MPI, batch, fortran fluent).

Je remercie mes parents, mon frère et ma soeur pour leur soutien.

Enfin, je ne remercie pas du tout les bikers du champ voisin du laboratoire et le bruit de la pompe à vide.



FIGURE 1 – Les douze travaux d'Héraclès, deuxième travail : L'hydre de Lerne

Introduction

L'avènement des microdispositifs ou Micro-Electro-Mechanical Systems (MEMS) à permis au cours des 20 dernières années un renouveau de l'étude des écoulements gazeux dans ces microdispositifs où la raréfaction joue un rôle prédominant. Le développement de la microfluidique gazeuse a rendu plus évidentes les zones d'ombres qui subsistaient dans la connaissance des milieux raréfiés. Sans entrer ici dans les détails on peut rappeler que les questions en suspens dans ce domaine tournent autour de la difficulté rencontrée dans la modélisation de l'écoulement lorsque la raréfaction devient importante et que les équations de conservation classiques ne sont plus utilisables. Nous n'aborderons ici que quelques aspects de ce problème puisque nous nous limitons à l'étude des écoulements isothermes stationnaires. Mais en revanche ces problèmes seront abordés sous un triple point de vue, théorique, numérique et expérimental ce qui permettra quelques recoupements intéressants. Avant de préciser les questions abordées et les résultats obtenus, il nous a paru nécessaire de rappeler quelques notions fondamentales. Nous pensons ainsi rendre plus faciles la compréhension des problèmes posés et l'évaluation des améliorations apportées par ce travail.

Nombre de Knudsen

L'état et les propriétés des écoulements raréfiés sont caractérisés d'abord par un nombre adimensionné appelé nombre de Knudsen :

$$Kn = \frac{\lambda}{l}.$$

λ est le libre parcours moyen, *i.e.* la distance moyenne parcourue par une molécule entre deux collisions intermoléculaires, et l est une longueur caractéristique du microdispositif qui sera ici la hauteur d'un microcanal ou le diamètre d'un microtube.

On sait que ce nombre apparaît dans la forme adimensionnée de l'équation de Boltzmann. Dans cette équation il indique alors l'influence relative de l'opérateur collisionnel par rapport à celle de l'opérateur de transport : l'opérateur collisionnel devient de plus en plus prépondérant quand $Kn \rightarrow 0$. Ce nombre est donc utilisé pour classifier les différents régimes d'écoulements ([Karniadakis & Beskok \(2002\)](#)) qui vont du régime hydrodynamique continu ($Kn < 0.01$) au régime moléculaire libre ($Kn > 10$). Cette classification est donnée sur la figure [2](#). Comme toutes les classifications, celle-ci est

Introduction

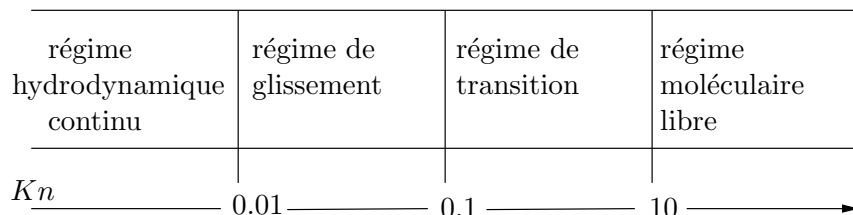


FIGURE 2 – Classifications des régimes d’écoulements en fonction du nombre de Knudsen.

sujette à discussion et comporte une part d’arbitraire ; les valeurs limites des différents domaines apparaissant sur la figure doivent être interprétées comme des ordres de grandeurs car la transition d’un régime à un autre (*e.g.* continu/glissement) n’est pas brutale mais progressive. Nous verrons dans un prochain chapitre que le traitement théorique de ces régimes d’écoulements se fait soit par une approche continue incluant des conditions limites propres au régime de glissement, soit par une approche cinétique pour les régimes transitionnel et moléculaire libre. L’ensemble de ces modélisations théoriques dépendent aussi de l’interaction gaz paroi, que nous traduirons par des rebonds des particules sur les surfaces solides dans la simulation DSMC.

Interaction gaz/paroi

L’interaction des molécules avec la paroi joue un rôle très important lorsque la raréfaction augmente. Dans ces conditions l’influence relative des collisions molécules / molécules décroît devant celle des rebonds des molécules à la paroi : en effet le nombre des premières décroît plus vite que celui des secondes et l’influence de la surface sur le comportement de l’écoulement augmente. L’étude de l’interaction gaz / paroi traduite par les rebonds sera détaillée dans le chapitre 2. Néanmoins quelques aspects de ce phénomène sont illustrés ici sur la figure 3, qui montre le rebond d’une particule sur une paroi dans deux cas extrêmes :

1. Sur la figure 3a, après la réflexion la température de la particule est identique à celle d’avant la collision. Il n’y a pas d’échange d’énergie entre la particule et la paroi : l’accommodation est nulle et la réflexion est dite spéculaire.
2. Sur la figure 3b, après la réflexion la direction et le module de la vitesse de la particule réfléchie prennent place dans une distribution maxwellienne à la température de la paroi, centrée sur la vitesse de cette paroi : les deux entités collisionnelles ont échangé de l’énergie : ici l’accommodation est dite totale et la réflexion diffuse.

En fait nous utilisons dans ce mémoire, une loi de réflexion de Maxwell qui exprime un flux de particules réfléchies compris entre ces deux cas extrêmes. Cette loi d’interaction que Maxwell a choisie sur des bases phénoménologiques exprime qu’une proportion α des particules est réfléchie de façon diffuse, et une proportion $(1 - \alpha)$ de façon spéculaire : α est alors appelé coefficient d’accommodation. La définition exacte

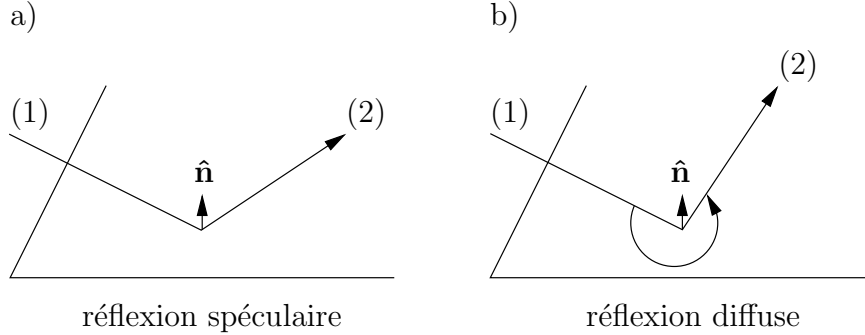


FIGURE 3 – Réflexion spéculaire ou diffuse d’une particule sur une paroi.

ainsi que l’interprétation de ce coefficient seront données dans le chapitre 2. Par ailleurs nous évoquerons aussi les limites de cette loi qui reste pourtant la plus utilisée pour exprimer les conditions limites cinétiques de paroi.

Etapes et objectifs de notre recherche

L’étude expérimentale des écoulements isothermes en microconduits concerne essentiellement des mesures de débits. Il s’agit en effet de la grandeur macroscopique la plus facile à atteindre. On constate pourtant que ces mesures sont assez rares et rarement très précises dès lors que l’on s’intéresse à une large gamme de nombres de Knudsen comme on le fait ici. Ainsi en microcanaux, au cours des cinquante dernières années on ne compte qu’une seule étude de ce type ([Porodnov *et al.* \(1974\)](#)). De plus cette étude ne concerne pas le type de conditions de pression auxquelles on va s’intéresser ici. Dans les microtubes les travaux expérimentaux sont à peine plus nombreux ([Dong \(1956\)](#), [Porodnov & Tuchvetov \(1979\)](#), [Tison \(1993\)](#)), mais là encore les conditions expérimentales ne correspondent pas à celles que nous nous fixons et sur lesquelles nous reviendrons plus loin. De plus ces mesures concernent rarement un seul conduit mais plutôt un paquet de microtubes montés en parallèles pour lesquels on estime un diamètre moyen.

Compte tenu de l’état de l’art dans ce domaine, nous avons choisi d’explorer systématiquement les débits en microtubes et en microcanaux dans une large gamme de Knudsen en recherchant une bonne précision et des conditions expérimentales (entrée/sortie) qui facilitent la modélisation. Dans le chapitre 1, on présente un banc de mesure qui a permis de mettre en oeuvre une méthode partiellement nouvelle, basée sur la mesure d’une faible variation de pression des réservoirs pendant l’expérience. On a pu ainsi augmenter significativement la précision des mesures et enrichir leurs interprétations. La validation de cette nouvelle méthode ainsi que la description détaillée des conditions expérimentales figurent aussi dans le chapitre 1.

La deuxième partie, importante, de cette recherche est présentée dans le chapitre 3. Elle porte sur la mise au point d’une simulation numérique dans les microcanaux, basée

Introduction

sur la méthode de Monte Carlo. Cette simulation est réalisée avec l'aide des principes de la programmation orientée objet. Ces principes nous ont permis de faciliter l'introduction de nouveaux concepts parmi lesquels : le traitement des conditions limites par création de réservoirs, la représentativité variable de la particule de simulation, et surtout la mise en place d'une fonction «zoom» qui associée à la représentativité variable nous permettra une meilleure obtention des valeurs macroscopiques de l'écoulement en certains points du microcanal. D'une manière générale ces innovations permettent d'améliorer l'efficacité du calcul.

La troisième partie de cette étude, présentée dans le chapitre 4, est basée sur l'analyse des résultats obtenus dans les microtubes. Nous avons conduit cette analyse en nous appuyant sur les rappels de modélisations préalablement exposés dans le chapitre 2. Dans ce chapitre 4, nous nous sommes notamment intéressés à la délimitation du régime de glissement avec des conditions limites du premier ou du second ordre ainsi qu'à la détermination des valeurs expérimentales du coefficient d'accommodation dans le cadre de la loi de réflexion de Maxwell. Cette étude a été menée dans des microtubes de différents diamètres, en vue d'évaluer aussi l'influence de la courbure. Enfin l'obtention de résultats dans le régime transitionnel et moléculaire libre a permis une comparaison avec les rares modèles cinétiques existant dans ces domaines et d'en tirer quelques conclusions.

Enfin, la quatrième partie exposée dans le chapitre 5 est consacrée, quand à elle, à l'étude des écoulements en microcanal. Ici encore l'étude est focalisée sur le domaine de validité du régime continu assorti de conditions limites de différents types suivant le nombre de Knudsen et sur la comparaison de différents modèles cinétiques sur l'ensemble des régimes d'écoulements. Mais de plus, dans ce chapitre, nous avons appliqué la méthode de calcul de Monte Carlo exposée dans le chapitre 3. Ainsi nous avons comparé nos débits expérimentaux aux résultats de cette simulation sur l'ensemble des régimes d'écoulements. Enfin cette méthode de simulation directe a été appliquée pour déterminer les profils de vitesse dans une section du microcanal *i.e.* pour explorer un domaine où il n'existe pas de résultats expérimentaux ; mais nous avons pu comparer les résultats de notre simulation dans ce domaine avec d'autres modèles théoriques, y compris avec le modèle continu en régime de glissement.

Chapitre 1

Dispositifs expérimentaux

1.1 Historique des mesures du débit massique

Les données microscopiques et macroscopiques des flux microfluidiques gazeux sont rares car ils sont difficiles à mesurer. Les expériences microfluidiques gazeuses consistent à déplacer un gaz par un gradient de pression (majoritaire dans la littérature) ou par un gradient thermique entre deux réservoirs à travers un microdispositif¹. Compte tenu des caractéristiques physiques de ces dispositifs et du manque de technologies adaptées, beaucoup de données intrinsèques de l'écoulement ne sont pas pratiquement accessibles (profil de vitesse par exemple), ou très difficile d'accès (profil de pression) [Pong *et al.* \(1994\)](#). La caractéristique de l'écoulement la plus facile à atteindre est le débit massique. Pour le mesurer, la première idée est d'utiliser des débitmètres perfectionnés comme l'ont fait [Jang & Wereley \(2004\)](#) et [Yao *et al.* \(2004\)](#). Mais cette méthode atteint rapidement ses limites car les débits minimum mesurables y sont de l'ordre de 10^{-8} kg/s. Au cours des 20 dernières années deux méthodes de mesure de débits se sont imposées. La «méthode à pression constante», la plus utilisée, et la «méthode à volume constant», moins utilisée, mais qui peut s'avérer extrêmement performante. Nous examinerons ces deux méthodes successivement en expliquant leur principe, leur fonctionnement et leurs performances. Ce dernier point est très important, car nous mesurerons des débits variant sur quatre décades *i.e.* de 10^{-9} à 10^{-13} kg/s.

1.1.1 Méthode de mesure à pression constante

La méthode de mesure du débit massique dite à «pression constante» consiste à déterminer le débit massique par la mesure de la variation d'un volume causée par un écoulement gazeux. Depuis l'avènement des microtechnologies et la maîtrise des techniques du silicium dans les années 80, l'intérêt pour la microfluidique gazeuse est croissant. L'un des pères des expériences en microfluidique [Harley *et al.* \(1995\)](#) a mesuré le débit massique par la méthode à pression constante. Ils déterminent le mouvement

1. Nous appellerons microdispositif, un dispositif dont la dimension caractéristique (hauteur, diamètre) est de taille micrométrique.

1. DISPOSITIFS EXPÉRIMENTAUX

d'une goutte de liquide dans une seringue grâce à un microscope. Le déplacement de la goutte modifie la taille du réservoir mais pas sa pression. Plusieurs auteurs [Pong *et al.* \(1994\)](#), [Maurer *et al.* \(2003\)](#) s'en sont inspirés et ont basé leur méthode de mesure sur ce même principe. D'autres, dans le cadre de la même méthode de base ont utilisé des techniques de détection légèrement différentes. [Zohar *et al.* \(2002\)](#) ont déterminé visuellement le déplacement du ménisque de la goutte dans une seringue graduée et [Colin *et al.* \(2004\)](#), [Lalonde \(2001\)](#) ont suivi le mouvement de la goutte par un système opto-électronique.

1.1.2 Méthode de mesure à volume constant

L'autre méthode de mesure utilisée en microfluidique est la méthode de mesure à volume constant. Elle consiste à mesurer une faible variation de la pression dans les réservoirs du dispositif expérimental. Cette méthode a été beaucoup moins utilisée : dans la littérature nous trouvons quelques références comme, [Porodnov *et al.* \(1974\)](#) qui ont basé leur méthode sur une mesure de l'évolution vers l'équilibre de la pression dans les réservoirs. [Arkilic *et al.* \(1997\)](#), et [Arkilic *et al.* \(2001\)](#) ont effectué une mesure différentielle entre le réservoir où a lieu la montée de pression et un réservoir de référence.

1.1.3 Méthode de mesure développée dans ce travail de thèse

Dans ce travail de thèse nous avons développé un dispositif expérimental pour mesurer des débits massiques gazeux (hélium, argon, xénon et azote) à travers des microdispositifs (microcanal et microtube). Dans un premier temps nous avons mis en place une méthode de mesure à pression constante, basée sur la détermination de la vitesse de déplacement de l'interface d'une goutte d'huile à l'aide d'une caméra numérique. Devant les inconvénients et les limites de cette méthode, nous avons mis en oeuvre une méthode «à volume constant» construite directement sur l'évolution de la pression dans les réservoirs. Ce choix, s'est révélé payant car cette dernière méthode a permis de faire des expériences dans tous les régimes d'écoulements raréfiés : le régime hydrodynamique, le régime de glissement, le régime transitionnel et le régime moléculaire libre.

1.2 Description du dispositif expérimental et méthodologie de la mesure

Nous mesurons le débit massique à travers un microtube et un microcanal en utilisant les deux méthodes précédemment évoquées. Bien que ces méthodes soient différentes, les conditions expérimentales et les microdispositifs sont similaires. L'expérience consiste à mesurer des débits massiques obtenus par un gradient de pression entre deux réservoirs dans des conditions isothermes. Les deux méthodes requièrent des réservoirs de large volume pour assurer une relative stabilité des paramètres ma-

1.2 Description du dispositif expérimental et méthodologie de la mesure

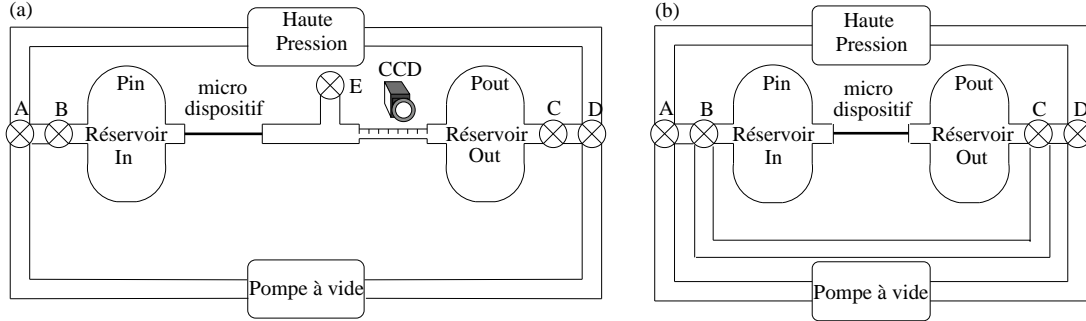


FIGURE 1.1 – La figure (a) représente le schéma du dispositif expérimental utilisé dans le première campagne de mesure. La figure (b) montre le schéma expérimental utilisé dans toutes les autres campagnes de mesure.

croscopiques des écoulements microfluidiques durant le temps de l'expérience. Cependant, les réservoirs ne doivent pas être trop grands pour permettre la détection d'une petite variation des paramètres macroscopiques (pression) dans un temps raisonnable. La durée de l'expérience est fixée de façon à ce que la variation de la masse du gaz dans les réservoirs n'altère pas la validité de l'hypothèse de stationnarité ni celle du caractère isotherme de la mesure. Les différents dispositifs expérimentaux sont visibles sur la figure 1.2. Bien que fondamentalement différentes, ces deux méthodes de mesures ont aussi un protocole expérimental similaire. L'écoulement a lieu dans un microdispositif (microcanal en silicium ou microtube en silice fondue) fixé entre deux réservoirs maintenus à des pressions quasi constantes P_{in} et P_{out} . A l'aide d'un manomètre et d'une vanne micrométrique A et B nous fixons la pressions dans le réservoir amont dit «In». De la même façon, nous fixons la pression dans le réservoir aval dit «Out» avec les vannes C et D. Dans ce réservoir, pour la méthode à volume constant,¹ la variation de la pression moyenne due à l'écoulement microfluidique est limitée $\pm 1\%$ (pour la mesure de la variation de pression) durant la durée de l'expérience. Cette contrainte impose une limitation de la durée τ de l'expérience qui varie entre quelques secondes et près d'une heure trente.

Les pressions se mesurent simultanément par deux détecteurs choisis en fonction des plages de fonctionnement (voir la table 1.1). La première mesure de pression s'effectue dans le réservoir situé en amont du microdispositif tandis que la deuxième mesure se fait dans le réservoir en aval. L'erreur sur la mesure de la pression elle même, dans chaque réservoir, dépend du détecteur (Tableau 1.1), elle est estimée inférieure à $\pm 0.5\%$. De plus, pour obtenir une variation de pression suffisamment précise et un traitement statistique satisfaisant, nous fixons aussi la variation de la pression au minimum à 60 fois la résolution du capteur.

1. Dans le réservoir In la variation relative de la pression par rapport à la pression moyenne sera plus petite car le volume de réservoir est plus grand et par ailleurs la pression y est plus élevée.

1. DISPOSITIFS EXPÉRIMENTAUX

Détecteurs	A	B	C	D
Inficon RDG (Inficon (2003))	25-1000 T	25-100 T	25-10 T	45-1T
Full Scale (FS) (Pa)	133322.	13332.2	1333.22	133.322
Pression max (Pa)	133322.	13332.2	1333.22	133.322
Pression min (Pa)	13332.	1333.2	133.32	13.332
Precision	0.20 % of reading			
Temperature effect on zero	0.0050 % FS / °K		0.015 % FS / °K	
Temperature effect on span	0.01 % of reading / °K			
Resolution	0.0015 % FS		0.0025 % FS	

TABLE 1.1 – Données techniques des capteurs de pression. Les quatre détecteurs ont des caractéristiques similaires mais des plages de pressions différentes.

1.2.1 Microdispositifs

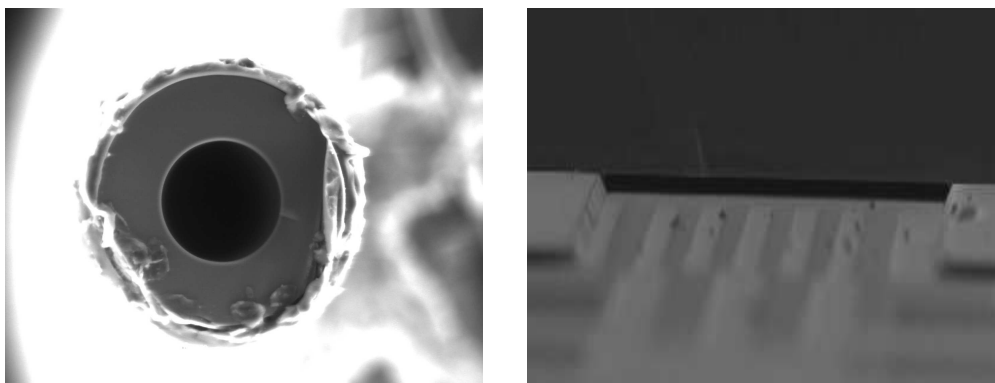


FIGURE 1.2 – Photos du microtube et du microcanal obtenues par le microscope électronique.

Les microdispositifs que nous utilisons sont de deux sortes : des microtubes de différents diamètres (25, 50 et $75\ \mu m$) et un microcanal (hauteur \times largeur, $10 \times 500\ \mu m$) (voir figure 1.2). Les microtubes sont en silice fondue désactivée¹. Ils sont utilisés couramment dans le cadre des technologies de chromatographie phase gazeuse (société SGE) tandis que le microcanal a été fabriqué spécialement au pôle Minatec de Grenoble.

La première tâche consiste à déterminer les caractéristiques de nos microdispositifs *i.e.* leur diamètre, leur longueur et leur rugosité. Les sections avant et arrière des microdispositifs sont scannées à l'aide d'un microscope à balayage électronique fonctionnant en «environmental scanning mode» (ESEM). Les longueurs sont quand à elles

1. Deux types de silice sont disponibles en chromatographie. La différence entre ces deux matériaux réside dans la réactivité de l'une (silice activée) et la non-réactivité de l'autre (silice désactivée) à l'égard de certaines molécules organiques

1.2 Description du dispositif expérimental et méthodologie de la mesure

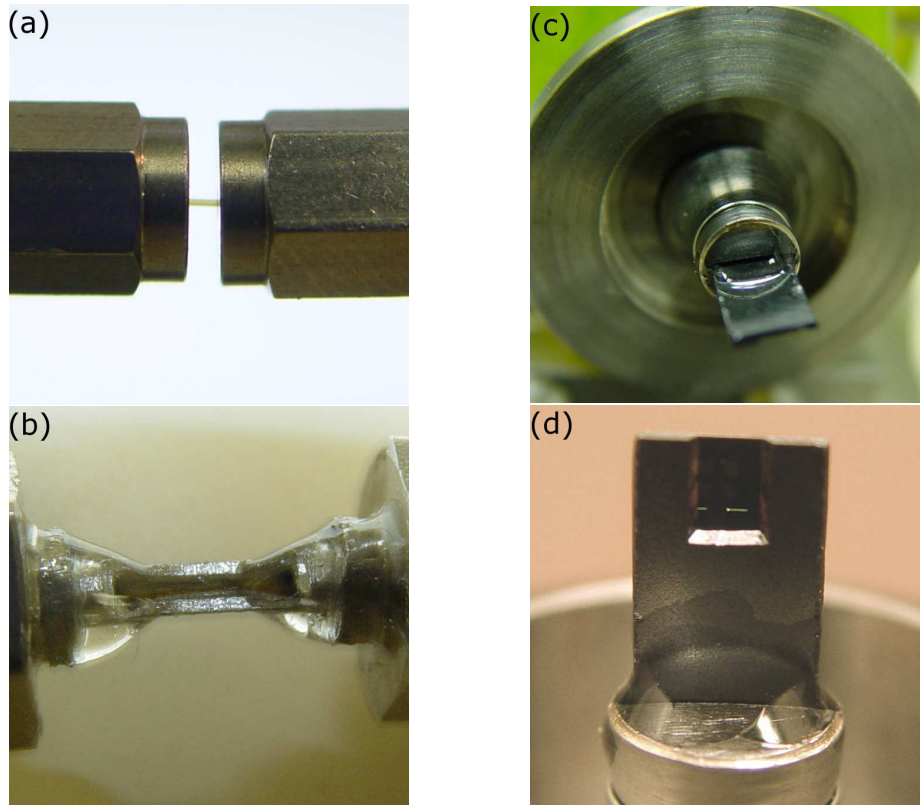


FIGURE 1.3 – Photos des systèmes de fixation pour les microtubes et le microcanal.

mesurées avec un pied à coulisse numérique. Les différentes caractéristiques (microtubes et microcanal) sont regroupées dans le tableau 1.2.

Le système de connexion employé dans notre expérience est standard. Il s'agit du système Swagelok™ (double bagues - écrou) avec des tubes de diamètre 1/4 pouce. Des joints toriques avec collier de serrage sont utilisés pour les connections des réservoirs, de la pompe à vide et des capteurs de pression. La partie la plus sensible concerne la fixation des microdispositifs qui nécessitent des solutions particulières.

Pour les microtubes, nous utilisons deux systèmes de fixation :

- Le premier, présenté sur la figure 1.3a, fait appel à des raccords Swagelok™ 1/4 x 1/16 de pouce (référence catalogue SS-400-6-1ZV) avec des ferrules SGE (15 % graphite/ 85 % Vespel®) adaptées pour assurer l'étanchéité. Ce système est très performant, néanmoins il nécessite un tube expérimental d'au moins 5 cm pour permettre une fixation optimale.
- Le second, représenté sur la figure 1.3b, utilise les même raccords. Mais ici, ces raccords ont été sciés pour permettre de glisser un tube 1/16 de pouce en acier qui sert de guide protecteur pour le microtube. L'étanchéité s'obtient avec une colle qui se polymérise sous l'action des l'ultraviolets.

1. DISPOSITIFS EXPÉRIMENTAUX

	Longueur (L)	Diamètre (D)	Hauteur (H)	Largeur (w)
microcanal	$9.39 \pm 0.01 \text{ mm}$	-	$9.38 \pm 0.2 \mu\text{m}$	$492 \pm 1 \mu\text{m}$
microtube $25 \mu\text{m}$	$5.30 \pm 0.01 \text{ cm}$	$25.2 \pm 0.35 \mu\text{m}$	-	-
microtube $50 \mu\text{m}$	$1.82 \pm 0.01 \text{ cm}$	$49.6 \pm 0.35 \mu\text{m}$	-	-
microtube $75 \mu\text{m}$	$2.33 \pm 0.01 \text{ cm}$	$75.3 \pm 0.35 \mu\text{m}$	-	-

TABLE 1.2 – Caractéristiques des microtubes et du microcanal. L’estimation des dimensions caractéristiques du microcanal est meilleure que celle du microtube : ici l’observation n’est pas sujette aux déformations optiques, alors que l’image du microtube paraît souvent elliptique à l’observation. La rugosité de nos microdispositifs est estimée comme inférieure à 20 nm

Le microcanal a nécessité la réalisation d’un système de fixation *ad hoc*. Le système se compose d’un morceau de tube 1/4 de pouce avec une olive conique partiellement colmatée (figure 1.3c) pour ne laisser passer que le microcanal (figure 1.3d). L’étanchéité est assurée encore une fois par l’emploi de la colle UV.

1.2.2 Étanchéité du système

Le contrôle de l’étanchéité du système et l’évaluation des fuites du milieu extérieure vers les réservoirs ont été réalisés de deux façons. La première consiste à fixer une pression identique dans les deux réservoirs et à contrôler l’évolution de la pression dans le réservoir où s’effectue la mesure (durant la durée type d’une expérience). Nous fixons une pression moyenne de 361.8 Pa dans les réservoirs et avec le détecteur C du tableau 1.1, nous enregistrons la pression dans le réservoir Out pendant 1 heure trente (figure 1.4). La fluctuation enregistrée est de l’ordre de la résolution du détecteur 0.19 Pa ce qui implique une fuite inférieure à $2.08 \times 10^{-14} \text{ kg/s}$. A première vue, ce résultat est satisfaisant pour la plupart des débits que nous avons mesurés ($2 \times 10^{-12} - 2 \times 10^{-9} \text{ kg/s}$) ; néanmoins un certain nombre d’expériences sont menées près du régime moléculaire libre, les débits atteignent alors des valeurs de l’ordre de $5 \times 10^{-13} \text{ kg/s}$ et la pression est de l’ordre de 13 Pa . Effectuer un test de fuite significatif à cette pression avec notre meilleur détecteur (D dans le tableau 1.1) n’est pas envisageable. En effet, laisser le gaz au repos durant une longue durée dans le réservoir à pour conséquence de chauffer le gaz au contact du détecteur (par l’électronique) et de provoquer un effet de transpiration thermique qui fausse la mesure (voir paragraphe 1.2.5). Pour obtenir un contrôle de fuites plus poussé à ce niveau de pression, il faut utiliser une autre méthode. Notre choix s’inspire des méthodes couramment mise en oeuvre dans les industries sensibles (nucléaire, spatiale). On utilise pour cela un détecteur de fuite à Helium (spectromètre de masse). Le système est mis sous vide avec une pompe primaire (généralement à palette) et une pompe secondaire (turbomoléculaire) pour atteindre une pression de l’ordre de 0.01 Pa , permettant l’utilisation du spectromètre de masse. Nous répandons ensuite de l’hélium autour du système : si l’hélium pénètre à l’intérieur, il est automatiquement détecté par le spectromètre, qui donne une estimation de la fuite.

1.2 Description du dispositif expérimental et méthodologie de la mesure

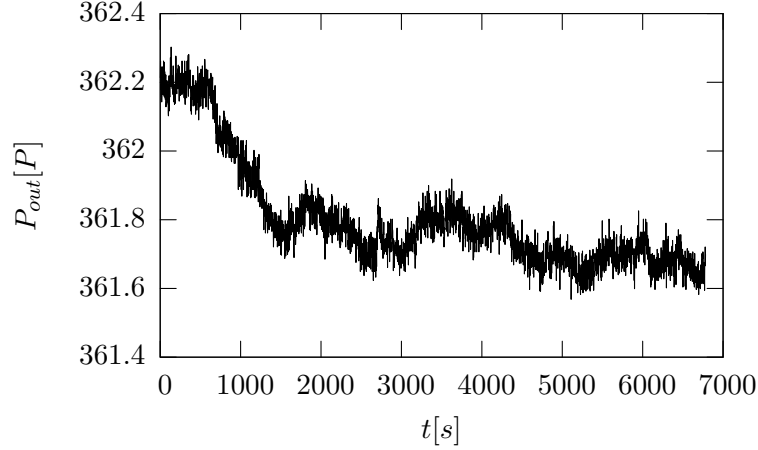


FIGURE 1.4 – Mesure de la pression dans le réservoir out pendant une expérience de test de fuite

Notre contrôle permet de conclure que la fuite du système est inférieure à $10^{-17} kg/s$. Ce résultat nous autorise à négliger l'influence des fuites sur nos mesures expérimentales ainsi que dans l'évaluation de l'erreur de mesure.

Les expériences sont réalisées à température ambiante autour de $296.5^\circ K$. Toutes les sources de chaleur intempestives sont neutralisées pour maintenir une température stable et justifier l'hypothèse de stationnarité isotherme. La température se mesure par une sonde de platine 4 fils. Durant les expériences la fluctuation maximale de la température par rapport à la température initiale est de $0.5^\circ K$. Dans le paragraphe 1.2.3, nous verrons que la variation de la température réellement due aux effets non-isothermes (*i.e.* aux échanges de chaleur dans le gaz) est bien plus faible.

Enfin, les données sont enregistrées à l'aide d'une carte d'acquisition National Instrument™ 20 bits double rampes pour éviter les problèmes de discrétisation des données. Le logiciel d'acquisition est LabView. Il permet de contrôler la carte, d'acquérir les données et de faciliter leurs traitements.

1.2.3 Méthode de mesure dite de la variation de la pression (volume constant)

Principe

Cette méthode permet de déterminer le débit massique en mesurant dans le réservoir de sortie, la variation de la pression provoquée par l'écoulement à travers le microdispositif. Pour mieux comprendre cette méthode de mesure, écrivons dans le réservoir «Out» la loi des gaz parfaits sous la forme :

$$P_{out}V = m\mathcal{R}T, \quad (1.1)$$

1. DISPOSITIFS EXPÉRIMENTAUX

où V est le volume du réservoir «Out», \mathcal{R} la constante spécifique du gaz. P_{out} , T et m sont respectivement la pression, la température et la masse du gaz dans le réservoir aval. Considérons maintenant une variation dq de n'importe quel paramètres thermodynamiques q dans le réservoir «Out» mesurée pendant une durée τ au voisinage du temps t . Cette variation dq est faible devant 1 et selon l'équation (1.1) elle vérifie :

$$\frac{dP_{out}}{P_{out}} = \frac{dm}{m} + \frac{dT}{T}. \quad (1.2)$$

En divisant les deux termes de l'équation (1.2) par la durée de l'expérience τ et en utilisant l'équation (1.1) nous obtenons :

$$\frac{dm}{\tau} = \frac{V}{\mathcal{R}T} \frac{dP_{out}}{\tau} (1 - \varepsilon), \quad \varepsilon = \frac{dT/T}{dP_{out}/P_{out}}. \quad (1.3)$$

Si ε est négligeable devant 1, *i.e.* de l'ordre des incertitudes expérimentales, dm/τ s'identifie au débit massique Q_m à travers le microdispositif. La mesure de la variation de la pression dP_{out} donnera alors directement Q_m . On voit que la variation de la température dans le réservoir peut perturber significativement la mesure. Comme nous l'avons vu dans le paragraphe 1.2.2, la fluctuation maximale de la température autour de sa valeur initiale est inférieure au demi degré Kelvin. Cependant, la variation de la température réelle du réservoir est très inférieure à cette estimation. Nous préférons donc calculer cette variation à partir d'un meilleur indicateur : l'écart type s de la température moyenne \bar{T} . Cet écart est défini par

$$s = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (T_i - \bar{T})^2} \quad (1.4)$$

où n est le nombre de point acquis pendant l'expérience, T_i est la mesure de la température pour chaque point de mesure. Dans le cas, le plus défavorable la variation relative de la température moyenne $\delta T/\bar{T} = s/\bar{T}$ est égale à 2×10^{-4} tandis que la variation de la pression $\delta P_{out}/P_{out}$ vaut 1×10^{-2} . La variation de ε est alors inférieure à 2×10^{-2} . Ainsi, le débit massique dans des conditions isothermes s'exprime par :

$$Q_m = \frac{V}{\mathcal{R}T} \frac{\delta P_{out}}{\tau}. \quad (1.5)$$

Cette mesure est affectée d'une erreur relative spécifique de 2×10^{-2} due à la variation de la température. Il est nécessaire de faire une remarque additionnelle. Bien que notre système expérimental soit protégé des phénomènes radiatifs et convectifs d'origine extérieures au laboratoire, la sonde de température est affectée par des phénomènes convectifs intérieurs au laboratoire. Ces phénomènes sont caractérisés par des temps caractéristiques supérieurs à la minute (*i.e.* par des fréquences inférieures à 0.0166 Hz). Ainsi, si l'on supprime les fréquences supérieures à 0.03 Hz dans la décomposition du signal provenant de la sonde de température, on ne touche pas au signal de l'échange thermique réel. Et l'incertitude due à la variation de température $\delta T/\bar{T}$ donnée par

1.2 Description du dispositif expérimental et méthodologie de la mesure

l'équation (1.4) est alors réduite dans un rapport 3. Cette analyse visant à mieux cerner la variation réelle de température n'a été appliquée que pour quelques expériences, effectuées sur des durées exceptionnellement longues (90 minutes).

Mesure de la variation de pression

Nous avons montré que les effets de variation de température sont négligeables sur notre mesure. Si nous considérons un écoulement stationnaire isotherme entre les deux réservoirs maintenus à des pressions constantes P_{in} et P_{out} , alors, l'expression du débit massique est donnée par l'équation (1.5). Pour déterminer ce débit, nous utilisons l'enregistrement de la pression P_i à différents instants t_i (figure 1.5). L'hypothèse d'un écoulement stationnaire justifie physiquement une expression polynomiale du premier degré en t ,

$$P_f(t) = at + b, \quad a = \frac{\delta P_{out}}{\tau} \quad (1.6)$$

Pour déterminer a et b nous avons utilisé la méthode des moindres carrés pour un nombre de points variant entre 50 et 3000 suivant l'expérience. La pertinence du calcul du coefficient a est confortée par la qualité de l'approximation linéaire caractérisée par un coefficient r^2 toujours supérieur à 0.9993. Suivant ces considérations et compte tenu d'une erreur négligeable sur la base de temps t_i de l'acquisition, l'écart type sur le coefficient a est donné par :

$$\Delta a = \left[\left(n \sum_{i=1}^n (P_i - P_f(t_i))^2 \right) / \left((n-2) \left(n \sum_{i=1}^n t_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n t_i \right)^2 \right) \right) \right]^{1/2}. \quad (1.7)$$

D'après les précédentes remarques, la formule (1.7) représente une bonne approximation de l'erreur sur le coefficient a (*i.e.* $\delta P_{out}/\tau$) qui s'avère nettement inférieur à $\pm 0.5\%$. A partir des relations (1.5), (1.6) et (1.7), nous obtenons l'erreur sur la mesure du débit

$$\frac{\Delta Q_m}{Q_m} = \frac{\Delta V}{V} + \frac{\Delta T}{T} + \frac{\Delta a}{a}. \quad (1.8)$$

Où comme on l'a vu $\Delta T/T$ du aux effets non-isothermes est estimé à $\pm 2\%$. $\Delta V/V$ est l'incertitude sur le volume du réservoir ($\pm 2\%$) et $\Delta a/a$ l'incertitude sur le coefficient a ($\pm 0.5\%$). De plus, comme nous avons vu dans la section 1.2.2, les fuites sont très largement négligeables. L'erreur sur le débit massique obtenu par cette méthode est donc inférieure à $\pm 4.5\%$.

1.2.4 Méthode de mesure dite de la goutte (pression constante)

Principe

Dans la méthode dite de la goutte, le débit massique se mesure par la détermination de la vitesse de l'interface d'une goutte de liquide se déplaçant dans un tube calibré

1. DISPOSITIFS EXPÉRIMENTAUX

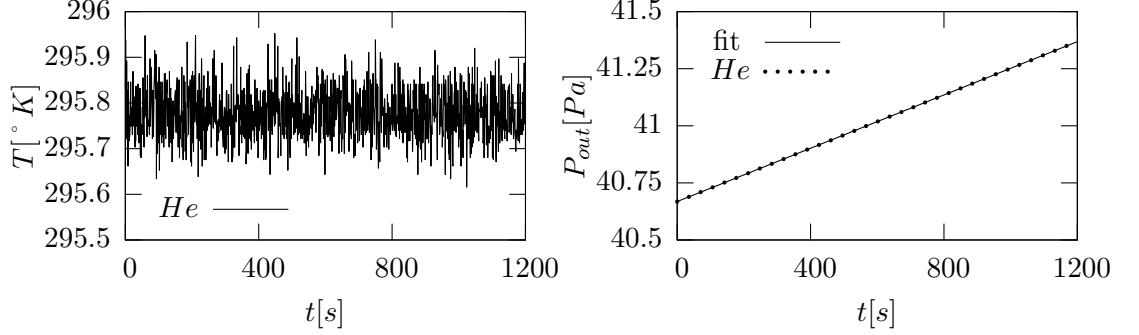


FIGURE 1.5 – Enregistrement de la température (figure de gauche) et de la pression (figure de droite) pour une expérience d'écoulement d'Helium dans un microtube de $25 \mu m$ avec $\mathcal{P} = P_{in}/P_{out} = 5$. La pression est représentée par une expression polynômiale du premier degré en t . Le coefficient $r^2 = 0.993$. Pour souci de clarté, seul un nombre restreint de points de pression est porté sur la figure de droite.

(seringue graduée). Dans nos expériences, nous utilisons une goutte d'huile de faible pression de vapeur saturante ($1.33 \times 10^{-3} Pa$) pour éviter l'évaporation à la surface de la goutte. La goutte est injectée par l'intermédiaire de la vanne E (figure 1.2) et son mouvement est enregistré par une caméra CCD 1290×980 pixels. Ainsi, sa position est suivie en fonction du temps. La figure 1.6a montre la position de la goutte dans la seringue et la figure 1.6b représente la superposition d'une même «ligne de pixels», tirée de la figure 1.6a pour toutes les images (instants) du film. Les deux lignes obliques sur le figure 1.6b représentent la position des deux extrémités de la goutte en fonction du temps. La pente de ces lignes correspond à la vitesse numérique de la goutte exprimée en *pixel/s*.

Notons, $X(t)$ la coordonnée spatiale de la surface de la goutte à un temps t , δX la distance parcourue par la surface durant le temps de l'expérience τ , δV la variation du volume correspondant, V_S le volume de la seringue et L la longueur de la seringue. Considérant l'hypothèse de stationnarité, le débit volumique s'écrit :

$$Q_v = \frac{\delta V}{\tau} = \frac{V_S}{\tau} \frac{\delta X}{L}. \quad (1.9)$$

Si nous notons δN_X et N_L les dimensions en pixels correspondant respectivement à δX et à L sur l'image 1.6(b) :

$$\frac{\delta X}{L} = \frac{\delta N_X}{N_L}. \quad (1.10)$$

De l'équation (1.9), nous tirons

$$Q_v = \frac{V_S}{N_L} \frac{\delta N_X}{\tau}, \quad Q_m = \frac{Q_v P_{out}}{\mathcal{R}T}. \quad (1.11)$$

1.2 Description du dispositif expérimental et méthodologie de la mesure

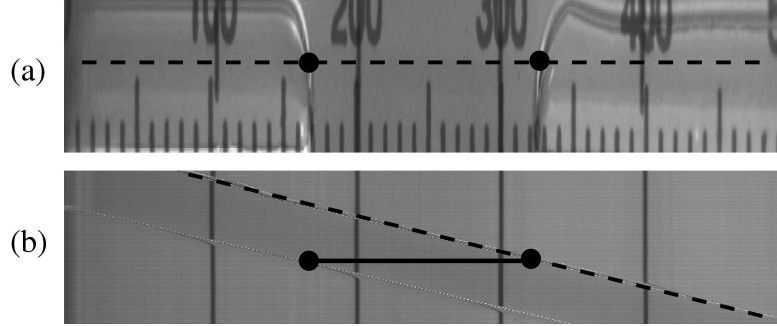


FIGURE 1.6 – La figure (a) représente une image particulière de l'enregistrement numérique de la goutte à un instant donné. Nous avons sélectionné une ligne de pixels horizontale figurée en pointillés. La figure (b) s'obtient en accolant toutes les lignes extraites de (a) pour les images successives du film. On observe les fronts avant et arrière de la goutte. L'utilisation d'un des deux fronts permet d'obtenir la vitesse numérique de la goutte $v = \delta N_X / \tau$ (ligne oblique en pointillés)

Où le débit massique Q_m se déduit aisément du débit volumique Q_v , car l'écoulement en aval de la goutte, dans la seringue, est pratiquement incompressible. En effet le calcul de la variation de pression entre l'entrée et la sortie de la seringue selon Poiseuille est,

$$\Delta P = \frac{8\mu Q_v L}{\pi R_S^4} \quad (1.12)$$

où μ est la viscosité, $L = 76.23\text{mm}$ la longueur de la seringue et $R_S = 1.73\text{mm}$ son rayon. Les expériences basées sur l'utilisation de la goutte ne concernent que l'azote. Pour un débit volumique moyen de $1.44 \times 10^{-10}\text{kg/s}$, on obtient une variation de pression $\Delta P = 2.14 \times 10^{-15}\text{Pa}$ entre l'entrée et la sortie de la seringue. La variation de pression est négligeable ce qui confirme l'incompressibilité du fluide dans cette partie du dispositif.

Mesure de la vitesse numérique

La pente ($\delta N_X / \tau$) est calculée en utilisant la méthode des moindres carrés sur les n valeurs de N_X enregistrées pendant l'expérience. Une fois de plus, l'hypothèse de l'écoulement stationnaire justifie la représentation de N_X par une fonction linéaire $N_{X_f}(t)$:

$$N_{X_f}(t) = \alpha t + \beta, \quad \alpha = \frac{\delta N_X}{\tau}. \quad (1.13)$$

Pour le tracé correspondant à cette interpolation, nous avons utilisé un nombre n de point proche de 100. Le facteur de qualité représenté par le coefficient r^2 est supérieur à 0.997 pour le calcul de α . L'écart type $\Delta\alpha$ se calcule de la même façon que dans

1. DISPOSITIFS EXPÉRIMENTAUX

l'équation (1.7), et l'erreur sur α (*i.e.* $\delta N_X/\tau$) est inférieure à 10^{-3} . L'erreur relative totale sur le débit massique calculée à partir des équations (1.11) et (1.13) suivant les méthodes classiques du calcul d'erreur s'exprime par :

$$\frac{\Delta Q_m}{Q_m} = \frac{\Delta V_s}{V_s} + \frac{\Delta \alpha}{\alpha} + \frac{\Delta N_L}{N_L} + \frac{\Delta P_{out}}{P_{out}} + \frac{\Delta T}{T} \quad (1.14)$$

où $\frac{\Delta T}{T}$ est de l'ordre de $\pm 2.5\%$ comme on l'a vu dans le paragraphe 1.2.3. Le volume de la seringue est $V_S = 500 \pm 5 \mu l$ et $N_L = 1123 \pm 15 \text{ pixels}$. L'erreur sur P_{out} , $\Delta P_{out}/P_{out}$ est plus importante que dans le paragraphe 1.2.3 à cause des variations de pressions causées par la goutte ; elle est estimée ici à 1.5% . L'erreur totale sur le débit massique par la méthode de la goutte est donc ainsi évaluée à $\pm 4.2\%$.

1.2.5 Avantages et inconvénients des deux méthodes de mesure

Le choix de la méthode de mesure retenue pour les expériences ultérieures dépend de sa facilité d'utilisation, de ses performances et des améliorations possibles. La méthode de la goutte a l'avantage de permettre un contrôle visuel de l'écoulement stationnaire mais cette méthode présente certaines difficultés.

- Il est difficile d'introduire la goutte d'huile dans la seringue sans causer un saut de pression dans le réservoir Out.
- Plusieurs gouttes peuvent se former dans la seringue ce qui perturbe la vitesse des gouttes et la mesure de la pression (figure 1.7).
- La goutte peut exploser et provoquer une perturbation de la pression. Cette variation de pression est évalué à 9.59 Pa . Elle correspond à la différence de pression entre les deux faces opposées de la goutte (figure 1.7).
- Il n'est pas toujours facile d'évaluer la position d'un point de l'interface gaz-paroi dans la seringue sur l'image (figure 1.6)) et de suivre l'évolution spatio-temporelle de ce même point lors du traitement numérique.

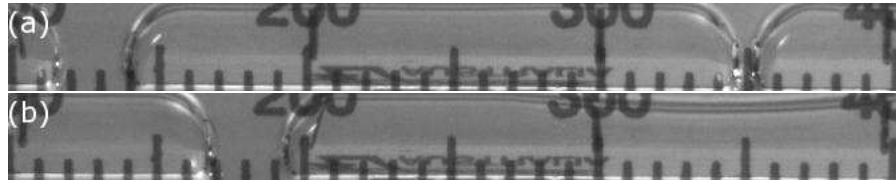


FIGURE 1.7 – (a) présente une image particulière d'un l'enregistrement numérique où deux gouttes se sont formées. L'image (b) est décalé de 1 seconde par rapport à de l'image (a). La goutte de droite a explosé et faisant refluer celle de gauche vers la droite.

La méthode de variation de pression est exempte de ces problèmes car l'acquisition des données et leurs traitements ne nécessitent aucune intervention humaine¹. Les

1. Lors de l'utilisation de la méthode de la goutte le traitement des images nécessitent l'utilisation de filtre graphique (seuil) qui demande un calibrage manuel. Ce type de fonctionnement introduit une

1.2 Description du dispositif expérimental et méthodologie de la mesure

données sont enregistrées et traitées automatiquement. De plus, la méthode de pression peut facilement être améliorée, en réduisant la taille des réservoirs, sans remettre en question l'hypothèse de stationnarité de l'écoulement ; car la durée de l'expérience se trouve alors réduite. Nous avons pu ainsi mesurer des débits correspondant à des nombres de Knudsen de l'ordre de 50 dans des durées d'expérience raisonnables. Par contre, le Knudsen le plus élevé que nous ayons obtenu avec la méthode de la goutte est de 0.0737, pour lequel le temps d'expérience dépassait déjà une heure trente. L'unique inconvénient de la méthode de variation de pression réside dans un effet de transpiration thermique (thermal creep) induit par la l'élévation de la température dans le détecteur [Poulter *et al.* \(1983\)](#) et [Jitschin & Röhl \(1987\)](#). Cet effet se produit lorsque les pressions sont comprises entre 13 et 133 Pa ; pour limiter l'importance de ce phénomène et ne pas perturber la mesure, nous avons effectué alors des expériences courtes de l'ordre de quelques minutes (2 ou 3). Enfin nous pouvons noter un dernier avantage au crédit de cette méthode : la validité de la mesure effectuée dans le réservoir aval peut être vérifiée par une mesure analogue dans le réservoir amont.

Pour l'ensemble de ces raisons, nous avons choisi la méthode de variation de pression pour effectuer nos mesures dans des écoulements de plus en plus raréfiés.

erreur difficilement quantifiable. Avec la méthode de pression nous supprimons cette intervention et nous gagnons en reproductibilité.

Chapitre 2

Modélisation : état de l’art et objectifs

2.1 Introduction

L’étude théorique des écoulements raréfiés peut s’envisager selon deux points de vue. Le premier, «macroscopique» consiste à appliquer le principe fondamental de la dynamique à un élément matériel, la particule fluide, pour obtenir les équations de Navier-Stokes ([Guyon *et al.* \(1994\)](#)). Cette approche ne s’intéresse pas aux molécules qui composent cet élément matériel et ignorent leurs interactions mutuelles. L’autre approche au contraire, considère un élément macroscopique composé de molécules, objets microscopiques, ayant une position, une vitesse, une énergie, et des interactions entre elles. Cette approche «microscopique» est modélisée généralement par l’équation de Boltzmann ([Brun \(1986\)](#)).

L’approche continue de Navier-Stokes privilégie l’étude du régime hydrodynamique car dans ce régime les collisions entre les molécules sont suffisamment nombreuses, permettant d’obtenir un équilibre thermodynamique local ainsi que la continuité des grandeurs macroscopiques (vitesse tangentielle du fluide, température) à la paroi. Une telle adéquation n’a rien de surprenant si l’on considère les liens structurels tissés entre l’approche cinétique basée sur l’équation de Boltzmann et les équations NS à travers la démarche de Chapman-Enskog. On sait en effet que les équations de conservation de la dynamique des fluides se déduisent aussi formellement de l’équation de Boltzmann. On les obtient alors sous forme d’équations de transfert exprimant le bilan macroscopique des invariants collisionnels microscopiques. Enfin on sait que pour expliciter ces équations il faut exprimer les coefficients de transport : viscosité et conductivité. Dans l’approche classique basée sur les principes fondamentaux de la dynamique, on fait appel pour cela à des lois phénoménologiques dites de fermeture. Mais il est bien connu que les coefficients de transport du système NS s’obtiennent aussi en utilisant la solution «d’ordre 1» de l’équation de Boltzmann linéarisée suivant le nombre de Knudsen Kn . Il est donc clair *a priori* qu’un tel système conviendra pour les situations faiblement raréfiées où Kn reste faible devant 1 et où les collisions sont assez nombreuses

2. MODÉLISATION : ÉTAT DE L'ART ET OBJECTIFS

pour assurer, au moins loin de la paroi, une situation locale proche d'un état équilibre thermodynamique.

Quand la raréfaction augmente, le régime hydrodynamique laisse la place au régime de glissement. Le nombre de collisions locales diminue entre les molécules, en même temps que diminue l'influence relative des collisions intermoléculaires par rapport aux collisions avec la paroi. Une discontinuité significative de la vitesse tangentielle du fluide et un saut de température apparaissent à la paroi. L'application des équations de Navier-Stokes nécessite alors l'utilisation de conditions limites qui intègrent ce saut de température et ce glissement de vitesse.

Lorsque raréfaction devient encore plus importante un régime transitionnel se développe où l'utilisation des nouvelles conditions limites n'est plus suffisante pour rendre l'approche continue pertinente. Le recours à la théorie cinétique (où à une approche équivalente) devient nécessaire car la validité de ces approches est pratiquement indépendante de la raréfaction.

Dans ce chapitre, nous ne donnerons que les éléments essentiels des différentes théories. Nous insisterons surtout sur les aspects qui permettent l'exploitation et l'interprétation de nos résultats expérimentaux, notamment les conditions limites de paroi.

2.2 Régime hydrodynamique et régime de glissement

C'est en régime hydrodynamique et en régime de glissement que les microécoulements gazeux ont été le plus étudiés. Cela s'explique sans doute par l'existence dans ce régime d'équations analytiques (dérivées du système NS) et aussi par des débits plus facilement mesurables puisque plus élevés que pour des régimes plus raréfiés. Néanmoins, nous verrons que les mesures y sont assez rares, surtout en microtube où la section plus faible que dans les microcanaux (à Knudsen équivalent) réduit la valeur du débit. Dans ce paragraphe, nous donnons une description sommaire de la modélisation continue existante, en insistant sur les conditions de paroi (premier ordre ou deuxième ordre) qui sont associées à cette modélisation en régime de glissement. Pour autant, on ne perdra pas de vue que le recours à la modélisation cinétique (ou DSMC) reste toujours possible dans ce régime.

2.2.1 Modélisation analytique approchée

Nous allons présenter ici les équations bidimensionnelles relatives à des microcanaux de grande largeur. Nous préciserons éventuellement ensuite comment ces équations sont modifiées en microtube.

Nous prenons en compte les particularités géométriques de l'écoulement ($\epsilon = H/L \ll 1$ qui permet de négliger les effets d'entrée et de sortie), ainsi que ses particularités physiques : ici les variations des grandeurs macroscopiques (pression, vitesse longitudinale et masse volumique) sont du même ordre de grandeur que ces grandeurs elles-mêmes et le nombre de Mach est petit devant un. Nous obtiendrons ainsi un système simplifié dont l'expression finale dépendra étroitement des conditions limites de paroi.

Conditions limites à la paroi

Pour un écoulement gazeux isotherme la condition limite de glissement du second ordre «suivant le nombre de Knudsen» est donnée par Cercignani (1964) sous la forme générale :

$$u_s = \pm \sigma_p \frac{\lambda}{k_\lambda} \left(\frac{\partial u}{\partial n} \right)_w - \sigma_{2p} \frac{\lambda^2}{k_\lambda^2} (\Delta u)_w \quad (2.1)$$

où $\frac{\partial u}{\partial n}$ est la dérivée dans la direction normale à la paroi et Δ est l'opérateur laplacien. Dans cette expression générale σ_p et σ_{2p} sont les coefficients de glissement du premier et du second ordre que nous commenterons plus loin. Par ailleurs on note dans la formule (2.1) la présence du libre parcours moyen λ dont une expression générale s'écrit sous la forme :

$$\lambda = k_\lambda \frac{\mu}{P} \sqrt{2\mathcal{R}T}, \quad (2.2)$$

où P, T et \mathcal{R} sont respectivement la pression, la température et la constante spécifique du gaz. L'expression exacte de λ dépend évidemment du modèle de potentiel qui décrit l'interaction moléculaire, par l'intermédiaire du coefficient k_λ et de la viscosité μ : $\mu = \mu_{ref}(T/T_{ref})^\omega$ où la température de référence $T_{ref} = 275.15^\circ K$, ω est l'indice de viscosité. Dans les modèles d'interactions les plus courants k_λ est un coefficient constant sans dimension. Les modèles aux quels on se réfère dans ce mémoire sont :

- D'abord, le modèle des sphères rigides (modèle HS) *stricto sensu* (Brun (1986)) où $k_\lambda = \frac{8}{5\sqrt{\pi}}$ et $\omega = \frac{1}{2}$.
- En suite, le modèle proposé par Chapman & Cowling (1970) qui est très proche du modèle des sphères rigides et pour lequel on adopte $k_\lambda = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$ et $\omega = \frac{1}{2}$.
- Et enfin, le modèle des sphères rigides variables (VHS) Bird (1994) qui paraît plus réaliste. Dans ce dernier modèle $k_\lambda = \frac{(7-2\omega)(5-2\omega)}{15\sqrt{\pi}}$ dépend du gaz à travers l'indice de viscosité ω qui pour ce modèle varie selon la nature du gaz. L'ensemble de ces paramètres sont présentés dans la table 2.1.

Il faut enfin ajouter deux remarques sur l'utilisation de la relation (2.1) :

1. En toute rigueur cette expression est proposée par Cercignani (1964) pour un écoulement de type Poiseuille où la vitesse ne dépend pas de la coordonnée x qui décrit la direction de l'écoulement. Nous admettons néanmoins cette forme de relation pour développer notre modèle théorique, car elle est très largement utilisée. Nous discuterons ensuite l'expression des coefficients σ et leur dépendance en fonction de certains paramètres.
2. On peut *a priori* se poser la question de la pertinence d'une relation (2.1) du second ordre suivant λ (ou Kn), lorsqu'elle est associée, comme c'est le cas dans ce mémoire, avec un système d'équation du premier ordre (NS). A cet égard des arguments ont été donnés par Cercignani (1964) tendant à montrer que dans les systèmes d'écoulements symétriques les termes du second ordre proviennent essentiellement des conditions de paroi. Ainsi si l'on utilise loin de la

2. MODÉLISATION : ÉTAT DE L'ART ET OBJECTIFS

Paramètres	<i>Xe</i>	<i>Ar</i>	<i>He</i>	<i>N₂</i>
Viscosité (μ_{ref}) [Ns/m^2] $\times 10^{-5}$	2.107	2.117	1.865	1.656
Index de viscosité (ω)	0.85	0.81	0.66	0.74
Constante spécifique (\mathcal{R}) [$J/kg\ K$]	63.	208.	2077.	297.
k_λ	0.658	0.684	0.786	0.731
Masse moléculaire [$g\ mol^{-1}$]	131.29	39.95	4.00	28.00

TABLE 2.1 – Paramètres des gaz utilisés dans nos expériences et simulations

paroi une modélisation du second ordre (*i.e.* les équations de Burnett à la place de celles de NS), les termes du second ordre provenant de ce traitement se révèlent négligeables devant ceux de la relation (2.1).

Voyons maintenant les différentes formes particulières de (2.1).

Dans le microtube cylindrique (Graour *et al.* (2006)) le laplacien se réduit à sa partie radiale du fait de la symétrie du système. La formule (2.1) devient :

$$u_{stu} = \pm \frac{\sigma_p}{k_\lambda} Kn \left(\frac{\partial u}{\partial \tilde{r}} \right)_w - \frac{\sigma_{2p}}{k_\lambda^2} Kn^2 \left(\frac{1}{\tilde{r}} \left(\frac{\partial}{\partial \tilde{r}} \tilde{r} \frac{\partial u}{\partial \tilde{r}} \right) \right)_w, \quad (2.3)$$

où \tilde{r} est la coordonnée radiale adimensionnée par le rayon R et où le nombre de Knudsen local $Kn = \lambda(x)/R$. Dans le microcanal de section rectangulaire ($H \ll w$) cette formule devient simplement :

$$u_{sca} = \pm \frac{\sigma_p}{k_\lambda} Kn \left(\frac{\partial u}{\partial \tilde{y}} \right)_w - \frac{\sigma_{2p}}{k_\lambda^2} Kn^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial \tilde{y}^2} \right)_w. \quad (2.4)$$

où \tilde{y} est la coordonnée dans la direction normale à la paroi, adimensionnée par la hauteur H du canal et où le nombre de Knudsen local $Kn = \lambda(x)/H$. C'est cette dernière équation qui sera utilisée pour le système d'équations en microcanal dans le paragraphe suivant. Dans ce prochain paragraphe, nous développerons le système d'équations qui décrit l'écoulement dans un canal plan. Comme nous l'avons indiqué au début de ce paragraphe, nous préciserons éventuellement ensuite les variantes à introduire en symétrie cylindrique.

Il faut maintenant commenter les propriétés des coefficients de glissement σ_p et σ_{2p} introduits dans la relation (2.1). D'une manière générale ces coefficients dépendent du modèle d'interaction entre les molécules. Mais, nous verrons lors de la discussion des résultats de quelle façon cette dépendance peut être précisée.

Historiquement le coefficient du premier ordre σ_p a été calculé pour la première fois en fonction du coefficient d'accommodation α de la composante tangentielle de la quantité de mouvement par Maxwell (Maxwell (1878)) qui obtient :

$$\sigma_p = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{2 - \alpha_M}{\alpha_M}. \quad (2.5)$$

2.2 Régime hydrodynamique et régime de glissement

	σ_p	σ_{2p}
Albertoni <i>et al.</i> (1963)	1.016	-
Kogan (1969)	1.012	-
Cercignani (1964)	1.016	0.7667
Deissler (1964)	-	$9\pi/32$

TABLE 2.2 – Valeurs théoriques des coefficients de glissement du premier et du second ordre.

Maxwell établit cette relation à partir d'un bilan de force. Dans ce bilan il admet le caractère Newtonien du fluide jusqu'à la paroi et néglige ainsi l'influence de la couche de Knudsen sur le coefficient de glissement. Dans le cas de l'accommodation totale la formule (2.5) conduit à une valeur de 0.886 pour σ_p alors que, en prenant en compte l'influence de la couche de Knudsen à l'aide d'un modèle BGK, Albertoni *et al.* (1963) puis Kogan (1969) ont trouvé respectivement dans ces mêmes conditions d'accommodation, $\sigma_p = 1.016$ et $\sigma_p = 1.012$.

Pour tenir compte de cette influence et pour l'intégrer dans une expression plus générale de σ_p , traduisant une réflexion non complètement diffuse, Loyalka (1975) a proposé :

$$\sigma_p = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{2 - \alpha_L}{\alpha_L} (\sigma_p(1) - 0.1211(1 - \alpha_L)), \quad (2.6)$$

dans cette formule $\sigma_p(1)$ représente la valeur 1.016 trouvé par Albertoni *et al.* (1963). Cette expression a été obtenue par l'auteur sur la base d'une compilation de ses résultats numériques et de leur comparaison avec l'expression (2.6) semi-empiriquement. Dans ce travail, nous nous référerons surtout à l'expression (2.5) pour des raisons historiques et à (2.6) pour des raisons physiques même si bien d'autres auteurs ont modélisé l'influence de la couche de Knudsen (Welander (1954)).

La signification du coefficient σ_{2p} est moins claire. Il semble *a priori* que σ_{2p} soit lié à σ_p (Cercignani (1990), Colin (2004)). Mais sa signification physique n'en demeure pas moins une question ouverte. Des valeurs numériques de ce coefficient ont été calculées notamment par Albertoni *et al.* (1963) sur la base du modèle BGK. Comme on l'a évoqué précédemment, ce calcul ne prend pas en compte l'existence d'un gradient de vitesse dans le sens de l'écoulement et par ailleurs il concerne *a priori* un écoulement plan. Néanmoins la valeur qu'il donne ($\sigma_{2p} = 0.7667$) constitue une première estimation. Cette valeur n'est pas très éloignée de celle que donne une étude plus phénoménologique conduite par Deissler (1964) (où $\sigma_{2p} = 9\pi/32$). On trouve ces valeurs dans la table 2.2.

En régime de glissement, nous nous proposons de pallier les insuffisances de la modélisation, plus précisément au niveau de ce coefficient σ_{2p} du second ordre. A partir des mesures de débits réalisées pour divers différentiels de pression, pour différents gaz et pour différentes courbures de la paroi, nous nous efforcerons de préciser la structure de σ_{2p} ainsi que sa dépendance à l'égard de ces différents facteurs. Comme on l'a déjà évoqué, l'autre objectif de ce travail, en régime de glissement, sera de préciser les

2. MODÉLISATION : ÉTAT DE L'ART ET OBJECTIFS

domaines de validité respectifs des approches continues de premier et de second ordre. On verra que ces domaines seront essentiellement définis par les valeurs du nombre de Knudsen moyen de l'écoulement.

Enfin pour terminer ce tour d'horizon sur les conditions de glissement, il faut signaler que de nombreux auteurs ([Barber & Emerson \(2005\)](#), [Karniadakis & Beskok \(2002\)](#), [Bird \(1994\)](#), [Chapman & Cowling \(1970\)](#), [Hadjiconstantinou \(2003\)](#), [Lang & Loyalka \(1984\)](#) et [Sharipov & Seleznev \(1998\)](#)) définissent des coefficients réduits A_1 et A_2 :

$$A_1 = \sigma_p/k_\lambda, \quad A_2 = \sigma_{2p}/k_\lambda^2. \quad (2.7)$$

Certains ont rassemblé ou calculé des coefficients sous cette forme. On constate des différences sensibles entre les résultats prévus par les différentes approches théoriques surtout en ce qui concerne A_2 (coefficient du second ordre) dont on a déjà vu qu'il était le plus mal connu.

Équations de l'écoulement

Compte tenu des hypothèses rappelées au début du paragraphe, l'équation de quantité de mouvement (équation de Stokes) conduit à une forme analytique de la vitesse de l'écoulement dans le microcanal. Moyennant l'équation (2.4) ([Graour *et al.* \(2006\)](#)) le profil de vitesse s'écrit :

$$v(y) = -\frac{H^2}{8\mu} \frac{dP}{dx} \left(1 - 4 \left(\frac{y}{H} \right)^2 + 4A_1 Kn(x) + 8A_2 Kn^2(x) \right), \quad (2.8)$$

où u est la composante longitudinale de la vitesse (la composante normale v est d'ordre ϵ) et où $Kn(x) = \frac{k_\lambda \mu}{P(x)H} \sqrt{2\mathcal{R}T}$.

En intégrant le flux de masse sur une section de largeur unité du microcanal, à l'aide de l'équation (2.8) et de la loi des gaz parfaits sous la forme $\rho = P/\mathcal{R}T$, nous obtenons une expression locale du débit massique dépendant du gradient de pression

$$Q_{ca} = -\frac{H^3 P}{12\mu \mathcal{R}T} \frac{dP}{dx} (1 + 6A_1 Kn(x) + 12A_2 Kn^2(x)). \quad (2.9)$$

L'intégration entre 0 et L du débit massique donné par l'équation (2.9), compte tenu de sa conservation dans la direction de l'écoulement, permet d'obtenir une expression qui ne dépend plus que de la pression d'entrée, de la pression de sortie et de la température :

$$Q_{ca} = \frac{H^3 P_{out}^2}{24\mu \mathcal{R}T L} \mathcal{F}(\mathcal{P}, Kn_{out}),$$

$$\mathcal{F}(\mathcal{P}, Kn_{out}) = \mathcal{P}^2 - 1 + 12A_1 Kn_{out}(\mathcal{P} - 1) + 24A_2 Kn_{out}^2 \ln \mathcal{P}, \quad (2.10)$$

où $\mathcal{P} = P_{in}/P_{out}$ est le rapport de pression entre l'entrée et la sortie du microcanal, Kn_{out} est le nombre de Knudsen calculé pour la pression aval.

Selon [Sharipov \(1999b\)](#), l'influence des parois latérales sur le débit massique peut être prise en compte par un facteur multiplicatif $1 - 0.63H/w$. Or, dans nos expériences

2.2 Régime hydrodynamique et régime de glissement

$H/w = 0.019$, ce facteur correctif est donc égal à 0.99 ; c'est pourquoi nous avons négligé l'influence des parois latérales.

En intégrant l'équation (2.9) de 0 à x , nous obtenons une expression implicite de la pression dans le canal. En utilisant un développement limité, on explicite cette relation implicite par la formule approchée :

$$\frac{P(x)}{P_{out}} = \sqrt{(\mathcal{P} + 6A_1Kn_{out})^2 + \left(6A_1Kn_{out} + 12A_2Kn_{out}^2\frac{1}{\mathcal{P}}\right)^2 + Kn_{out}^2(24A_2 - 36A_1^2) - \mathcal{F}\frac{x}{L}} - \left(6A_1Kn_{out} + 12A_2Kn_{out}^2\frac{1}{\mathcal{P}}\right). \quad (2.11)$$

Enfin, en combinant les équations (2.8) et (2.11), nous obtenons le profil de vitesse le long du microcanal :

$$u(y) = \frac{H^2}{8\mu} \times \frac{\mathcal{F}/L \left(1 - 4\left(\frac{y}{H}\right)^2 + 4A_1Kn(x) + 8A_2Kn^2(x)\right) P_{out}}{2\sqrt{(\mathcal{P} + 6A_1Kn_{out})^2 + \left(6A_1Kn_{out} + 12A_2Kn_{out}^2\frac{1}{\mathcal{P}}\right)^2 + Kn_{out}^2(24A_2 - 36A_1^2) - \mathcal{F}\frac{x}{L}}}. \quad (2.12)$$

2.2.2 Expressions du débit massique

La relation (2.10) représente, sous la forme dimensionnelle, le débit par unité de largeur exprimé à l'aide du nombre de Knudsen de sortie. Le débit massique dimensionnel correspondant pour une largeur w s'écrit en fonction du nombre de Knudsen moyen :

$$\dot{M}_{ca} = \frac{H^3w\Delta PP_m}{12\mu\mathcal{R}TL} \left(1 + 6A_1Kn_m + 12A_2\frac{P_m}{\Delta P} \ln \mathcal{P} Kn_m^2\right), \quad (2.13)$$

où $\Delta P = P_{in} - P_{out}$, Kn_m est le nombre de Knudsen moyen calculé avec la pression moyenne $P_m = 0.5(P_{in} + P_{out})$.

Dans des conditions analogues, le débit massique dans un microtube de diamètre D et de longueur L obtenu avec les équations de Navier-Stokes et les conditions limites du second ordre présentées dans l'équation (2.3) est (Ewart *et al.* (2006)) :

$$\dot{M}_{tu} = \frac{\pi D^4 \Delta PP_m}{128\mu\mathcal{R}TL} \left(1 + 8A_1Kn_m + 32A_2\frac{P_m}{\Delta P} \ln \mathcal{P} Kn_m^2\right). \quad (2.14)$$

Les deux équations (2.13) et (2.14) peuvent être écrites sous une forme adimensionnée S_{ca} pour le microcanal,

$$S_{ca} = \dot{M}_{ca} \left/ \frac{H^3w\Delta PP_m}{12\mu\mathcal{R}TL} \right. = 1 + 6A_1Kn_m + 12A_2\frac{P_m}{\Delta P} \ln \mathcal{P} Kn_m^2, \quad (2.15)$$

2. MODÉLISATION : ÉTAT DE L'ART ET OBJECTIFS

et S_{tu} pour le microtube,

$$S_{tu} = \dot{M}_{tu} \left/ \frac{\pi D^4 \Delta P P_m}{128 \mu \mathcal{R} T L} \right. = 1 + 8A_1 K n_m + 32A_2 \frac{P_m}{\Delta P} \ln \mathcal{P} K n_m^2 \quad (2.16)$$

sous une forme générale condensée :

$$S = 1 + A^{theor} K n_m + B^{theor} K n_m^2, \quad (2.17)$$

où suivant les géométries $A^{theor} = 8A_1$ ou $6A_1$ et $B^{theor} = 32A_2 \frac{P_m}{\Delta P} \ln \mathcal{P}$ ou $12A_2 \frac{P_m}{\Delta P} \ln \mathcal{P}$. Les expressions analytiques du débit massique (2.14 - 2.17), nous permettront de comparer les modèles théoriques existants et les résultats des mesures en régime de glissement, de déterminer les coefficients de glissement expérimentaux et de faire évoluer la modélisation du premier et du second ordre.

2.3 Régime transitionnel

Le régime transitionnel est le domaine le plus compliqué pour la modélisation car il nécessite la résolution de l'équation de Boltzmann. Une large revue des résultats principaux est disponible dans [Sharipov & Seleznev \(1998\)](#). Nous présenterons ici quelques idées de base ainsi que les résultats nécessaires à l'analyse de nos résultats expérimentaux. Les premières analyses théoriques faites par [Cercignani & Daneri \(1963\)](#) portent sur la modélisation d'un écoulement entre deux plaques infinies pour un large intervalle de nombre de Knudsen. Ces auteurs ont obtenu une expression du débit massique à partir de l'équation cinétique BGK pour une accommodation totale à la paroi. Par ailleurs en microtube [Cercignani & Sernagiotto \(1966\)](#) puis [Cercignani & Pagani \(1967\)](#) ont résolu cette équation en utilisant respectivement une méthode numérique directe et une méthode variationnelle. Le modèle BGK a été abondamment utilisé ensuite dans les années 70, notamment par Loyalka et ses collaborateurs. Ainsi, les écoulements entre deux plaques parallèles ont été traités par [Loyalka *et al.* \(1975\)](#) pour une accommodation non totalement diffuse. Un peu plus tard [Loyalka *et al.* \(1976\)](#) ont résolu numériquement le modèle BGK pour un conduit rectangulaire. Enfin le modèle BGK a été appliqué à nouveau aux écoulements en microtubes par [Porodnov & Tuchvetov \(1978\)](#) puis par [Lo & Loyalka \(1982\)](#) pour une réflexion diffuse à la paroi et par [Porodnov & Tuchvetov \(1978\)](#), [Porodnov & Tuchvetov \(1979\)](#) et [Lo *et al.* \(1984\)](#) pour une réflexion spéculaire-diffuse.

Les traitements cinétiques utilisant différentes équations modèles ont été repris et développés ensuite par Sharipov en microcanal pour une accommodation totale aux parois : ainsi on peut citer [Sharipov \(1999a\)](#) pour le modèle BGK et [Sharipov \(1999b\)](#) pour le S-modèle (construit avec un nombre Prandtl plus réaliste que BGK). En microtube ce type d'étude basée sur des équations modèles cinétiques avait été également repris auparavant par [Sharipov \(1996\)](#) puis prolongé récemment (pour des tubes de rayon variable) par [Sharipov & Bertoldo \(2005\)](#). On notera à propos de ces différents modèles (BGK, S-model) que, selon la revue de [Sharipov & Seleznev \(1998\)](#) évoquée

précédemment, la différence de leurs résultats respectifs n'excèdent pas 1% en microcanal et 2% en microtube, du moins en écoulements isothermes.

L'autre approche cinétique usuelle (basée sur la linéarisation de l'équation de Boltzmann (EBL)), a été développée dans les années 90 par Ohwada *et al.* (1989) et Hickey & Loyalka (1990) pour des plaques parallèles en supposant l'accommodation totale et un utilisant le modèle des sphères dures pour d'écrire l'interaction moléculaire. On peut encore remarquer que selon Sharipov & Seleznev (1998) l'écart entre les résultats du modèle EBL et ceux du modèle BGK (ou S-modèle) est de l'ordre de 2%.

Compte tenu de ces faibles écarts, nos résultats expérimentaux (Ewart *et al.* (2007a) et Ewart *et al.* (2007b) et notre modélisation Ewart *et al.* (2006)) ne seront pas comparés à tous les modèles cinétiques. En microcanaux on les comparera essentiellement avec les modèles BGK (Sharipov (1999b) et Loyalka *et al.* (1975)) ainsi qu'avec le modèle EBL (Ohwada *et al.* (1989)) pour les profils de vitesse. D'autre part on se référera surtout à Porodnov & Turchetov (1979) pour les écoulement en microtube.

2.3.1 Débits massiques

Dans tous les modèles présentés précédemment, on suppose que le gradient de pression local ne devient pas trop élevé. Plus précisément, dans un microcanal de hauteur H et dans un microtube de rayon R , on pose :

$$\nu_{ca} = \frac{H}{P} \frac{dP}{dx} \ll 1, \quad \nu_{tu} = \frac{R}{P} \frac{dP}{dx} \ll 1. \quad (2.18)$$

D'après les auteurs cités au paragraphe précédent, cette hypothèse permet la résolution des équations cinétiques et le calcul du débit massique \dot{M}_{ca} à travers une section du microcanal (pour une largeur standard w) ou du débit massique \dot{M}_{tu} pour une section du microtube. Ici les les quantités adimensionnées correspondantes s'écrivent :

$$\Sigma_{ca} = -\frac{\sqrt{2\mathcal{RT}}}{HwP\nu_{ca}} \dot{M}_{ca}, \quad \Sigma_{tu} = -\frac{\sqrt{2\mathcal{RT}}}{\pi R^2 P \nu_{tu}} \dot{M}_{tu}. \quad (2.19)$$

On note que lorsque le gradient de pression $\frac{dP}{dx}$ varie peu le long du microdispositif le débit massique adimensionné est alors peu influencé par ses variations. Dans ce cas ce débit dépend essentiellement du paramètre de raréfaction de l'écoulement (*i.e.*, à un facteur près, de l'inverse du nombre de Knudsen) :

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{H}{\lambda}, \quad \delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{R}{\lambda}. \quad (2.20)$$

Ces débits massiques adimensionnés, représentés par l'équation (2.19), ont été calculés et tabulés en fonction du paramètre de raréfaction local δ par de nombreux auteurs : dans les microcanaux, on peut citer Loyalka *et al.* (1975), Loyalka *et al.* (1976), Ohwada *et al.* (1989), Hickey & Loyalka (1990), Sharipov (1999a), Sharipov (1999b) et dans les microtubes Porodnov & Turchetov (1979), Lo & Loyalka (1982), Sharipov (1996), Sharipov & Bertoldo (2005).

2. MODÉLISATION : ÉTAT DE L'ART ET OBJECTIFS

Dans presque tous ces travaux de recherche, le paramètre de raréfaction est supposé quasi-constant le long du microdispositif. Il faut noter que cette hypothèse est beaucoup plus restrictive que les conditions (2.18) car elle implique $\frac{L}{P} \frac{dP}{dx} \ll 1$. Or, dans nos conditions expérimentales, la pression le long du microdispositif varie dans un rapport qui peut aller de 3 à 5. Cette dernière inégalité n'est donc pas réalisée (même si (2.18) est vérifiée). Par suite le paramètre de raréfaction δ n'est pas constant le long du microdispositif.

Toutefois certains auteurs [Sharipov & Seleznev \(1998\)](#) considèrent que puisque pour un microcanal ou un microtube suffisamment long, le gradient de pression local, défini au sens de l'équation (2.18), est toujours faible quelque soit le gradient de pression, il est possible d'étendre cette approche théorique au cas d'un rapport de pression élevé : il suffit pour cela de prendre en compte, après-coup, la variation du paramètre de raréfaction. Se basant sur les remarques qui suivent la relation (2.19) ces auteurs admettent en effet que dans une section correspondant à un paramètre de raréfaction local le débit adimensionné Σ défini en (2.19) est le même que celui que l'on obtiendrait pour un paramètre de raréfaction quasi-constant (et pour un $\frac{dP}{dx}$ constant). Nous reviendrons dans la discussion des résultats sur le degré de validité de cette hypothèse. En admettant pour l'instant le point de vue de ces auteurs, on intègre les deux membre des équations (2.19) le long du microdispositif. En utilisant la propriété de la conservation du débit (\dot{M}), on en déduit les relations suivantes :

$$G_{ca} = \frac{L\sqrt{2\mathcal{RT}}}{H^2w(P_{in} - P_{out})}\dot{M}, \quad G_{tu} = \frac{L\sqrt{2\mathcal{RT}}}{\pi R^3(P_{in} - P_{out})}\dot{M} \quad (2.21)$$

avec

$$G(\delta_{in}, \delta_{out}) = \frac{1}{\delta_{out} - \delta_{in}} \int_{\delta_{in}}^{\delta_{out}} \Sigma(\delta) d\delta. \quad (2.22)$$

Comme l'a fait remarquer [Sharipov \(1999a\)](#) on constate que G est la valeur moyenne de Σ le long du microdispositif et qu'il ne dépend plus du gradient de pression local mais uniquement de sa valeur moyenne. Les équations (2.21) et (2.22) peuvent être utilisées pour calculer numériquement le débit adimensionné $G(\delta_{in}, \delta_{out})$ à l'aide des tables de $\Sigma(\delta)$ donné dans [Sharipov \(1999b\)](#) où le débit adimensionné $\Sigma(\delta)$ a été obtenu par la résolution des équations cinétiques BGK pour un microcanal de rapport H/w variable.

Par ailleurs, pour évaluer l'influence des interactions gaz/paroi sur le débit massique, nous utiliserons les résultats donnés par le modèle cinétique BGK associé à une réflexion quasi-diffuse à la paroi mis en oeuvre [Loyalka \(1975\)](#) dans les microcanaux et [Porodnov & Tuchvetov \(1979\)](#) dans les microtubes. Dans le cas des microcanaux [Loyalka \(1975\)](#) considère un écoulement entre deux plaques parallèles, où les débits seront donc calculés par unité de largeur. Notons enfin qu'une solution du modèle cinétique BGK a été calculée dans un microcanal de rapport $H/w = 1$ ([Loyalka et al. \(1976\)](#)), malheureusement cette valeur est très éloignée de notre rapport expérimental (0.019).

2.4 Régime moléculaire libre

Dans l'étude de ce dernier régime, le débit massique entre deux plaques a été calculé analytiquement par [Cercignani & Daneri \(1963\)](#) en considérant une accommodation totale à la paroi ; entre les deux plaques on constate que l'expression du débit, adimensionnée ici comme en régime transitionnel, tend vers l'infini quand le nombre de Knudsen augmente infiniment ([Cercignani & Daneri \(1963\)](#)). Par contre dans un microcanal de largeur finie, le débit massique, toujours adimensionné suivant [\(2.21\)](#), converge vers une valeur asymptotique lorsque Kn tend vers l'infini ; ce résultat est obtenu par [Loyalka *et al.* \(1976\)](#) et par [Sharipov \(1999b\)](#) pour une réflexion diffuse à la paroi. De plus pour les microtubes [Sharipov & Seleznev \(1998\)](#) ont montré que le débit adimensionné converge vers une valeur asymptotique proportionnelle au coefficient d'accommodation.

Chapitre 3

Monte Carlo

3.1 Direct Simulation Monte Carlo

C'est à l'occasion de la mise au point de l'arme atomique qu'est apparue l'utilisation des nombres aléatoires dans la simulation numérique des phénomènes physiques. Depuis, l'utilisation de ces nombres s'est développée dans plusieurs domaines de la physique des supra conducteurs jusqu'aux gaz raréfiés. Dans ce dernier domaine, la méthode de Monte Carlo a d'abord été utilisée pour les problèmes de rentrées atmosphériques des engins spatiaux et plus récemment dans les écoulements microfluidiques subsoniques.

Par abus de langage, toutes les techniques qui ont recours aux tirages aléatoires sont dénommées méthode de Monte Carlo en référence au fameux casino situé dans cette ville.

3.1.1 Réflexions sur la méthode DSMC

Les propriétés macroscopiques des gaz dilués peuvent être décrites en faisant quelques hypothèses simples sur le mouvement des molécules du gaz :

- Les molécules ne subissent que des collisions élastiques binaires, ce qui résulte de la faible densité du gaz.
- La durée du choc est très petite devant le temps moyen entre deux collisions. C'est à la fois, la conséquence de la courte portée des interactions moléculaires et des valeurs les plus probables des vitesses d'agitation thermique des molécules aux températures usuelles. On considèrera donc des chocs comme instantanés.
- Entre les chocs, chaque molécule évolue indépendamment de ses voisines, animée d'un mouvement rectiligne uniforme. C'est l'hypothèse du chaos moléculaire.

Pour résumer, dans un gaz dilué, la trajectoire de chaque molécule est une succession de lignes droites brisées qui s'inscrivent entre les parois du dispositif contenant le gaz. Par conséquent, pour décrire complètement le mouvement d'une molécule, il suffit de connaître :

- Sa position et sa vitesse initiale dans le gaz.
- La façon dont deux molécules se comportent pendant un choc.

3. MONTE CARLO

- La manière dont elle rebondit sur les parois.

Exposé ainsi le problème paraît très simple, mais il est rigoureusement impossible de le résoudre exactement, car, même dans les faibles volumes considérés en micro fluide le nombre de molécules emprisonnées dans le dispositif expérimental est bien trop grand pour les capacités de calcul des ordinateurs. On peut noter aussi, que du point de vue expérimental, on se contente de mesurer des quantités moyennes qualifiées de macroscopiques comme la pression, la température, le flux de chaleur, le débit, la vitesse de l'écoulement ... Au niveau théorique on va transformer un problème discret et déterministe en un problème probabiliste continu qui conduit, dans le cadre des hypothèses énoncées plus haut, à l'établissement de l'équation de Boltzmann. Par nature, le traitement informatique n'opère que sur des quantités discrètes. C'est pourquoi la résolution numérique des problèmes aux dérivées partielles utilise des maillages de l'espace et des pas de temps (différences finies ou éléments finis). Face à la très grande complexité de la résolution de l'équation de Boltzmann différentes stratégies sont possibles. On peut d'abord considérer les équations macroscopiques de transfert déduites de l'équation de Boltzmann à partir des moments des invariants collisionnels. Ces équations correspondent aux équations de conservation de la mécanique des fluides et décrivent l'évolution des paramètres de la particule fluide. Toutefois cette démarche nécessite l'introduction de relation de fermeture (ou une connaissance de solutions approchées de l'équation de Boltzmann) pour expliciter les coefficients de transports. Or cette connaissance explicite n'existe quand régime hydrodynamique ou en régime de glissement (équations NS). En régime transitionnel ou moléculaire libre on ne peut éviter l'approche cinétique. Pour alléger le traitement numérique de cette approche cinétique, il existe des modèles discrétisant l'espace des vitesses (et les positions). Ces modèles s'apparentent ainsi aux modèles de gaz sur réseau voire aux automates cellulaires ([Gardner \(1970\)](#)).

Dans le milieu des années 70, [Bird \(1994\)](#) propose de revenir au problème du mouvement des molécules. Il donne des algorithmes qui permettent de traiter ce mouvement d'une manière probabiliste. Puisqu'il est hors de question de décrire le mouvement de toutes les molécules du gaz. On étudie simplement, à la manière de ce qui se fait dans les sondages d'opinion, le mouvement d'un nombre réduit de particules test. D'autre part, les collisions de ces particules test entre elles ne sont pas traitées de manière exacte mais de manière statistique à partir de la connaissance de la section efficace de diffusion qui est liée à la densité de probabilité pour que la particule réduite dans le repère de centre masse reparte, après le choc, dans une direction donnée. Pour fixer les idées, imaginons que les molécules soient représentées par des sphères dures, la collision de deux molécules en mécanique classique se traite exactement en fonction du paramètre d'impact. Cette notion de paramètre d'impact¹ n'est pas ici complètement pertinente pour des particules test qui représentent chacune un grand nombre de molécules auxquelles il est difficile d'attribuer le même paramètre d'impact. Néanmoins, en moyenne, ces

1. Du point de vue pratique, il n'est pas sûr que la précision des représentations des nombres en virgule flottante assure une précision suffisante pour déterminer le paramètre d'impact qui est de l'ordre de la taille de la molécule.

collisions conduiront à des distributions de vitesses de sortie conformes à celles prévues par l'utilisation de la section efficace de diffusion dans la cinétique des molécules réelles.

3.1.2 Objectif de la simulation

L'objectif principal de notre simulation est de calculer des paramètres macroscopiques caractéristiques des écoulements (notamment en régime transitionnel et proche moléculaire libre) dans les microtubes et les microcanaux. La question que l'on peut se poser est : pourquoi élaborer son propre programme alors qu'il existe de nombreux logiciels commerciaux ou universitaires qui permettent de traiter de nombreux problèmes de DSMC. En fait ces logiciels sont généralement de très gros codes qui ont pour but de simuler, les entrées d'engins spatiaux dans des atmosphères raréfiées [Dietrich & Boyd \(1996\)](#). Pour les problèmes que nous voulons traiter (calcul des débits massiques, des profils de vitesses ... dans les microtubes et les microcanaux) ils ne sont pas adaptés car ils traitent d'écoulements largement supersoniques [Dietrich & Boyd \(1996\)](#), [Wu & Tseng \(2001\)](#), alors que les nôtres ont des vitesses de quelques mètres par seconde. Il nous faut donc réduire drastiquement le bruit statistique en multipliant le nombre de particules test (*i.e.* de simulation) dans chaque cellule (jusqu'à 100000 [Sun & Boyd \(2002\)](#)) et par conséquent diminuer le nombre de cellules. De plus dans les problèmes de microfluidique les conditions d'entrées et de sorties tournent autour de la détermination de conditions de flux. Alors que dans les problèmes de rentrée atmosphérique les conditions amont loin de la paroi (où la vitesse du gaz est l'opposée de celle de l'engin) sont parfaitement connues.

Enfin, comme de plus nous voulons gérer un grand nombre de particules, notre code doit être capable de fonctionner en parallèle sur les machines en réseau multiprocesseurs de notre laboratoire. Toutes ces exigences nous ont dissuadé d'utiliser le code commercial de [Bird \(1994\)](#) comme l'ont fait [Xue *et al.* \(2000\)](#), [Wang & Li \(2004\)](#) et ont rendu, selon nous, nécessaire la conception de notre propre logiciel.

Ce logiciel doit être sûr et facilement évolutif pour être en adéquation permanente avec nos besoins qui changent en fonction du développement de notre recherche. Cet outil sera programmé suivant les principes de la programmation orientée objet. En effet, elle permet la réutilisation des codes, *i.e.* son caractère évolutif, par la mise en oeuvre de l'héritage et du polymorphisme. De plus l'encapsulation des données et des fonctions sensibles accroît la sécurité du logiciel. A notre connaissance, il n'existe qu'un seul programme de DSMC basé sur ces principes celui de [Dietrich & Boyd \(1996\)](#).

3.2 DSMC et programmation orientée objet

La programmation orientée objet (POO) a permis de faire progresser la fiabilité, la maintenance et le caractère évolutif des logiciels dans de nombreux domaines. Traditionnellement, depuis [Bird \(1994\)](#), les programmes de DSMC sont écrits en Fortran. Nous allons voir ici ce que peut apporter la POO dans ce type programme lorsqu'il est

3. MONTE CARLO

écrit en C++ [Stroustrup \(1991\)](#) et [Milewski \(2001\)](#). Penser objet, c'est d'abord analyser les constituants de notre problème, leurs comportements et leurs interactions. Cette analyse nous guidera dans la conception des classes à partir desquelles nous fabriquerons les objets qui simuleront de manière correcte et efficace les propriétés physiques d'un système expérimental ou d'un modèle.

3.2.1 Les particules tests

Il s'agit tout d'abord de décrire le mouvement des particules test, donc de connaître leurs positions et leurs vitesses. Les positions changent à chaque pas de temps en fonction de la vitesse. En fin de pas de temps les vitesses changent sous l'effet des collisions conformément au modèle de section efficace que l'on adopte. Pour cela, il faut des données supplémentaires qui sont caractéristiques des espèces moléculaires représentées par les particules tests comme la masse, le rayon, l'exposant de la loi de puissance qui décrit l'interaction en fonction de la température et que l'on peut relier simplement à la viscosité, au moins en régime continu, (modèle VHS) [Bird \(1994\)](#). Si on étudie des espèces moléculaires qui ont une structure interne (diatomique par exemple), il faut encore d'autres données pour décrire les modes internes (vibrations, rotations), leurs couplages et leur effets sur la dynamique de la collision. Par conséquent, chaque particule test sera caractérisée par ses vecteurs position et vitesse ainsi que par les propriétés physiques de son espèce¹.

3.2.2 Les parois

Pour déterminer complètement le mouvement des particules test, il faut connaître la manière dont elles rebondissent sur les parois du dispositif. Différents opérateurs kernels peuvent être employés pour traiter les rebonds sur différents types de parois imperméables : parois parfaitement diffuses, purement spéculaires, parois à réflexion Maxwellienne isotropes ([Maxwell \(1878\)](#)), réflexion de type Cercignani-Lampis ([Cercignani & Lampis \(1971\)](#)), ou réflexions anisotropes Dadzie-Méolans ([Dadzie & Méolans \(2004\)](#), [Méolans & Dadzie \(2005\)](#)). Ces opérateurs représentent une probabilité permettant de relier le flux de molécules réfléchies par la paroi au flux de molécules incidentes. Dans l'approche DSMC, il faut traduire tout cela en terme de probabilité : notamment la probabilité pour les molécules de quitter la paroi dans une direction donnée avec une vitesse donnée². Pour garder le maximum de flexibilité au programme, les objets parois sont mis en œuvre à travers une hiérarchie de classes en utilisant le mécanisme des fonctions virtuelles.

1. Ce sont ces caractéristiques qui se traduiront en données membres de la classe décrivant les objets particules test.

2. Compte tenu des caractéristiques de la particule incidente

3.2.3 Les cellules

Une fois le mouvement des particules test déterminé, il faut être capable de calculer des valeurs moyennes comme des pressions, des températures, des flux thermiques, des vitesses d'écoulement, des débits ... Dans le cadre de l'hypothèse des milieux continus ces quantités apparaissent comme des champs scalaires, vectoriels ou tensoriels dépendant du temps, reliées entre eux par des équations intégro-différentielles. Les propriétés de symétrie permettent d'envisager des solutions de dimension réduite plus facile à trouver. Dans un problème de DSMC, l'évaluation des valeurs moyennes des propriétés moléculaires est dévolue aux cellules. Pour que les valeurs moyennes ne soient pas trop fluctuantes, il faut un nombre suffisant de particules test par cellules¹. C'est donc la précision souhaitée sur ses valeurs moyennes que va dépendre le temps de calcul. Pour caractériser une cellule, il faudra, bien sûr, des données géométriques de position et de dimensionnement mais aussi la donnée du nombre de molécules que représente, dans chaque cellule, une particule test. La donnée de ce nombre permet de comparer les valeurs moyennes calculées sur les particules test aux quantités physiquement mesurables.

3.2.4 Les sous cellules

Comment peut on relier les particules test aux cellules ? Il faut analyser pour cela la manière dont sont traitées les collisions entre particules test. Comme le traitement des collisions est séparé du mouvement, il faut choisir un pas de temps qui est petit devant le temps moyen entre deux collisions pour ne pas introduire un biais trop important. Du point de vue algorithmique, nous verrons dans le paragraphe 3.4.4 que le problème des collisions qui est normalement de complexité N^2 , peut se réduire à un problème de complexité N . Cet algorithme ne met pas en jeu les positions relatives des particules. Mais cette insuffisance n'est pas très grave si les collisions s'effectuent dans un volume réduit c'est pourquoi, pour accroître la pertinence de la simulation, on divise les cellules en sous cellules de taille convenable et c'est au sein d'une même sous-cellule que seront traitées les collisions. Ce sont donc les sous cellules qui stockeront les particules tests.

3.2.5 La classe de simulation

La précédente analyse du rôle respectif des cellules et sous-cellules permet de comprendre la façon dont doit se faire le découpage de l'espace contenu dans le dispositif à simuler. La taille et le nombre de cellules sont déterminés par la nature de la propriété physique que l'on veut étudier. Par exemple, quand on étudie le débit massique² du gaz dans un micro-canal, celui-ci peut être décrit par une seule cellule puisque, en régime permanent, cette quantité est conservée à travers toutes les sections du tube. Par contre pour ce même microcanal, si l'on veut déterminer comment se comporte

1. Ce nombre dépend du cas physique étudié, de quelques dizaines pour un écoulement supersonique à quelques milliers pour un écoulement subsonique microfluidique

2. Il s'agit de l'unique quantité qui soit pour l'instant directement accessible dans nos expériences

3. MONTE CARLO

la pression le long de l'axe du tube, nous découperons le conduit suivant ses sections droites en cellules équidistantes si nous pressentons que le gradient de pression est constant ou quasi constant. Si nous voulons ensuite déterminer le profil transversal de la vitesse de l'écoulement parallèle à l'axe, nous subdiviserons les cellules précédentes suivant la hauteur du microcanal.

D'autre part le découpage en sous-cellules, qui ne sert qu'à traiter de la manière la plus réaliste possible, les collisions des particules test, doit être basé sur un rapport adéquat entre le pas de temps et le temps moyen entre collision (couramment 1/20). Le rôle de la classe simulation sera de traduire cette analyse en programme en organisant l'interactions des briques élémentaires que nous avons décrites dans les paragraphes précédents. Cette classe connaît donc la géométrie du problème à résoudre et les quantités dont on veut déterminer les valeurs moyennes. Cela signifie que c'est elle qui fixe la manière dont les cellules et les sous-cellules sont réparties dans l'espace. C'est elle qui gère le mouvement des particules test, y compris les rebonds sur les parois, qui ont lieu durant le pas de temps. A la fin du pas de temps, elle indique, en fonction de la position de la particule, à quelle cellule et sous cellule elle va appartenir. Elle s'occupe du reclassement des particules en fonction de cette information et finalement elle gère les collisions. En cas de parallélisation du code, elle gère aussi les échanges de particules test entre les processeurs.

3.3 Problèmes liés à la mise en oeuvre du programme

Nous avons maintenant une idée claire des objectifs que doit atteindre notre programme. Il s'agit maintenant d'envisager les moyens qui vont permettre d'optimiser l'utilisation de la mémoire et le temps de calcul.

3.3.1 Utilisation de pointeurs

Chaque particule test doit connaître les propriétés de l'espèce moléculaire à laquelle elle appartient. Le nombre d'espèce est bien plus petit que le nombre de particules test puisque un échantillon représentatif de notre problème doit avoir un nombre suffisant de particules test par espèce. Pour économiser de la mémoire chaque particule test connaîtra son espèce par l'adresse (pointeur) de la zone mémoire où sont stockées les valeurs numériques caractéristiques. Pour les propriétés des espèces moléculaires, chaque classe de simulation permettant de générer des objets pour chaque processeur est caractérisée par un tableau de pointeurs sur les données caractéristiques des espèces moléculaires à considérer. Pour gagner du temps, et ne pas encombrer inutilement la mémoire de l'ordinateur hôte par des réservations mémoires impliquant des tableaux de taille abusive, pour mettre en jeu chaque fois qu'il est utile le mécanisme des fonctions virtuelles, les objets dont nous aurons besoin seront manipulés uniquement à partir de leurs adresses obtenues par allocation dynamique de mémoire et stockées dans des

3.3 Problèmes liés à la mise en oeuvre du programme

variables pointeurs¹. La seule exception à cette règle se trouve au niveau de la gestion des échanges d'informations entre processeurs en cas de programmation parallèle ; car chaque processeur ne peut travailler que dans son propre «espace d'adressage» même si la mémoire est partagée. L'échange s'effectue alors sur les données membres des particules (positions, vitesses) avec l'aide d'API (Application Programming Interface) MPI (Message Passing Interface) qui permettent la synchronisation et la communication des différents processeurs.

3.3.2 Tableaux ou listes

Tableaux et listes sont des objets dynamiques dans lesquels on peut ranger différentes sortes d'objet élémentaires ; ici la plupart du temps ces objets élémentaires seront des pointeurs. Précisons que les tableaux et les listes dont nous allons parler sont des containers, «vector» pour les tableaux ou «list» pour les listes, qui appartiennent à la STL (Standard Template Library) livrée avec tout compilateur C++ [Milewski \(2001\)](#). Le choix du mode de stockage des poiteurs d'objets élémentaires dans des tableaux ou dans des listes dépend de la nature du problème. Lorsqu'il s'agit de ranger des pointeurs sur objet de type particule il est préférable d'utiliser des listes qui permettent de gérer de manière simple l'adjonction ou la suppression d'éléments. On évite ainsi les coûts induits par les remaniements de tableaux que provoqueraient les mouvements des particules test lors des changements de sous-cellules. Néanmoins, il est plus difficile de retrouver un élément dans une liste que dans un tableau. Pour remédier à ce problème en opère de la manière suivante : a chaque pas de temps la liste des pointeurs sur objet de type particule contenue dans chaque sous cellule est parcourue d'un bout à l'autre : à chaque itération que l'on effectue sur les pointeurs de la liste l'adresse de la particule correspondante est ôtée de la liste, sa nouvelle position est calculée (rebond(s) compris), la cellule et la sous-cellule de destination sont déterminées et l'adresse de cette particule test est stockée en début de la liste de destination. Cette façon de faire n'est pas pénalisante puisque le temps d'exécution est proportionnel à la taille de la liste de départ exactement comme le serait le temps de parcourt séquentiel des éléments d'un tableau. On réalise ici que les l'utilisation des pointeurs sur objet dans le cadre de liste permet d'exploiter à fond l'avantage que constitue la manipulation des objets à partir de leur adresse : nous transportons ainsi d'une liste à l'autre la seule adresse de la zone mémoire où est contenue l'information concernant la particule test ; nous n'avons pas à procéder au transport du contenu de l'information elle même.

Par contre quand on doit gérer un nombre fixe d'éléments, ce qui le cas pour les cellules et au sein d'une cellule pour les sous-cellules, il est alors plus économique d'utiliser des tableaux. Ainsi la classe de simulation utilisera un alors tableau de pointeurs sur cellules et la classe cellule utilisera un tableau de pointeurs sur sous-cellules.

1. Des langages comme C# ou Java font cela tout naturellement. Cependant, ils ralentissent l'exécution du programme puisque celui-ci s'exécute a travers le CLR ou la machine virtuelle Java.

3. MONTE CARLO

3.3.3 Calcul parallèle

Le moyen le plus direct pour diminuer le temps de calcul est d'effectuer un calcul parallèle en sollicitant un nombre plus ou moins important de processeurs. Mettre en oeuvre une parallélisation dans un code DSMC n'est pas une chose aisée, car contrairement à ce qui se passe pour un code aux différences ou aux éléments finis, la quantité d'éléments à transmettre et la destination sont différentes à chaque pas de temps.

La géométrie du système est découpée en plusieurs tranches, et chaque tranche est gérée par un processeur différent. Le processeur doit être capable de gérer l'ensemble des particules lui appartenant durant un pas de temps même si elles quittent leur domaine spatiale d'origine. Si une particule quitte son domaine initial à l'issue du pas temps, le processeur doit être capable de l'envoyer au voisin approprié.

Les bibliothèques utilisées pour le calcul parallèle (MPI 1.1) ne sont pas adaptées à l'utilisation des pointeurs car l'allocation dynamique de mémoire est impossible entre processeurs. Une particule ne peut pas être échangée entre processeur par un simple échange de pointeurs. L'échange doit donc être fait par l'intermédiaire d'une structure MPI permettant de transférer les données elles mêmes : or ce choix est très coûteux en bande passante et en temps de calcul [Aoyama & Nakano \(1999\)](#). En effet la taille d'un pointeur sur une particule est de 8 octets¹, tandis que l'échange d'une particule nécessite au minimum six `double` pour la position et la vitesse (x, y, z, v_x, v_y, v_z) qui sont codés chacun sur huit octets et deux `unsigned short int` codés chacun sur 4 octets pour l'indexation finale de la particule dans la cellule et la sous cellule. Finalement, l'échange d'une seule particule par une structure MPI nécessite 56 octets contre 8 pour un échange de pointeur. Ainsi, l'échange d'une molécule entre 2 processeurs demandent 7 fois plus de temps que le déplacement d'une particule dans le domaine d'un même processeur. De plus, ce temps ne prend pas en compte le temps nécessaire pour la suppression de la particule de son domaine d'origine et sa reconstruction dans son nouveau domaine.

3.4 Principes et algorithmes d'une simulation Monte Carlo

Dans les simulations de type Monte Carlo, la totalité des molécules ne sont pas simulées car cela demanderait une puissance de calcul extraordinaire. Ainsi, la simulation s'effectue sur des particules qui représentent un grand nombre de molécules réelles : il s'agit d'une représentation des molécules. Lors de la simulation les mouvements et les collisions entre les molécules sont dissociés ; le mouvement consiste à déplacer la totalité des particules simulées suivant leur vitesse durant un pas de temps en prenant en compte les différents rebonds possibles avec les parois. Naturellement, le traitement «exact» des collisions entre particules simulées consisteraient à faire collisionner l'ensemble des particules de simulation par paire. Or, ce principe est totalement inefficace et très coûteux en calcul car la probabilité de collision de simulation entre deux parti-

1. Les pointeurs sur particule sont soit codés sur 8 octets si l'on génère un exécutable en 64 bit où 4 octets si l'exécutable est en 32 bit.

cules est très faible. Pour contourner ce problème Bird (1994) a développé une méthode performante dite «no-time-counter» (NTC) basée sur un nombre réduit de collisions. Bien qu'approchée, cette méthode donne d'excellents résultats. Elle sera examinée en détail par la suite (section 3.4.4).

3.4.1 Initialisation

Pour démarrer la simulation, il faut une configuration initiale réaliste pour les particules tests. Dans chaque cellule, ou du moins pour celles du microconduit, la situation initiale sera une situation d'équilibre thermodynamique, avec une pression et une température les plus proches possibles de celles de la configuration finale : ceci pour diminuer le temps de calcul et pour ne pas converger vers un autre état stationnaire différent de celui que nous souhaitons. Dans un cas d'écoulement isotherme la distribution initiale des pressions de chaque cellule du conduit obéit à une loi linéaire. Dans ces conditions, nous écrivons à l'instant initial :

$$P_{Cell}V_{Cell} = n_V kT_{Cell}, \quad (3.1)$$

où P_{Cell} , V_{Cell} , T_{Cell} sont la pression, le volume, la température d'initialisation dans la cellule, et n_V le nombre de molécules réelles dans ce volume. Si l'on note N_S le nombre de particules de simulation dans ce même volume, alors le nombre N_R de molécules réelles représentées par une particule de simulation est égal à,

$$N_R = \frac{P_{Cell}V_{Cell}/kT_{Cell}}{N_S} \quad \text{avec} \quad n_V = N_R N_S. \quad (3.2)$$

La distribution des particules tests sera aléatoire suivant une distribution uniforme dans le volume de la cellule et leurs vitesses seront choisies conformément à la distribution de Maxwell (voir annexe A, page 115).

Pour la détermination de N_R , nous sommes dès lors confronté à un choix pour fixer N_R . La première possibilité, la plus naturelle et le plus simple à mettre en oeuvre, consisterait à fixer un même N_R pour tout le système. Ce choix est celui qui est adopté le plus souvent car il facilite la programmation du logiciel. Mais un tel choix aurait pour conséquence un nombre de particules simulées par cellule dépendant des conditions thermodynamiques de la cellule. Dans nos problèmes d'écoulements isothermes la pression de sortie est couramment trois fois plus faibles que la pression d'entrée, si bien qu'avec ce choix classique le nombre de particules simulées varierait dans un rapport trois entre les cellules d'entrée et de sortie. Comme par ailleurs les fluctuations des valeurs moyennes varient comme la racine carrée du nombre des particules tests, pour conserver partout aux valeurs moyennes la précision que permettraient les données d'entrées, il faudrait se résoudre à multiplier par trois le nombre de particules par cellule. Il est nettement préférable d'affecter à chaque cellule un nombre constant de particules test ce qui conduit alors à un facteur N_R variable avec la cellule.

Ce choix qui pourrait compliquer énormément la programmation du logiciel si on stockait les particules tests dans un tableau, n'entraîne que des modifications mineures si

3. MONTE CARLO

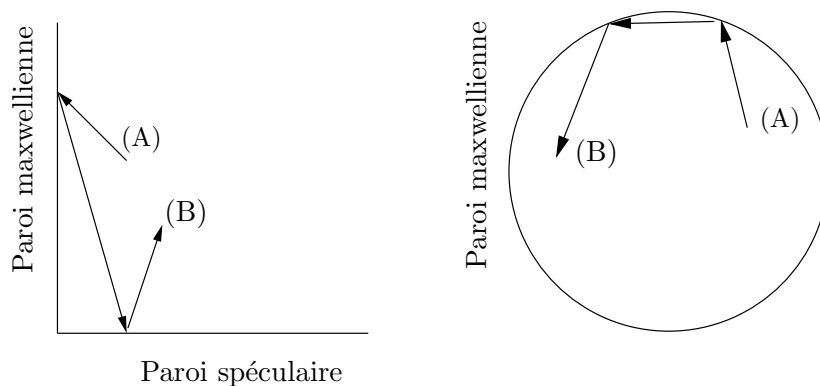


FIGURE 3.1 – Sur le schéma ci-dessus, les traits pleins représentent le mouvement d’une particule de (A) vers (B) durant un pas de temps dans un microtube et un microcanal en prenant en compte l’action des différentes parois sur sa trajectoire.

nous utilisons des listes comme nous le faisons ici. Chaque cellule aura un N_R spécifique en fonction de sa pression initiale, et lorsqu’une particule quitte sa cellule initiale pour une autre, elle est soit détruite, soit multipliée de façon à ce que la conservation du nombre de molécules réelles transmises soit respectée.

Les autres avantages de cette méthode sont la possibilité de créer une fonction zoom et celle d’équilibrer la charge de calcul *i.e.* d’améliorer l’efficacité de la parallélisation. Nous reviendrons en détail sur tous ces points dans la section 3.5.

3.4.2 Mouvements et rebonds de la particule sur un pas temps

A première vue le mouvement des particules est simple : comme on l’a énoncé dans l’introduction, il s’agit d’un mouvement rectiligne dont la direction change si la molécule entre en collision avec une autre particule ou rebondit sur la paroi. Les collisions sont traitées à la fin de chaque pas de temps tandis que les rebonds sont traités au cours du pas de temps.

Lorsque la trajectoire de la particule rencontre une paroi, la particule rebondit avec sa nouvelle vitesse déterminée suivant les caractéristiques du rebond (maxwellien, spéculaire, ...) puis elle continue son mouvement sur la durée qui reste dans le pas de temps considéré. Cet algorithme s’implante facilement dans une géométrie simple. Mais, dans notre étude les simulations sont effectuées en microcanaux et en microtubes. Or, à cette échelle, dans les microdispositifs une particule peut subir plusieurs collisions avec différentes parois pendant la durée d’un pas de temps. Cette situation est illustrée sur la figure 3.1. Lorsque nous effectuons un calcul classique le nombre de particules est fixé au alentour de 2×10^5 et le nombre de pas de temps et de 4×10^6 , ainsi le nombre total de configuration différentes est égal à 8×10^{11} . Devant ce nombre et devant la complexité des trajectoires, qui lui sont associées, il faut créer une fonction indépendante des cellules mais prenant en compte la géométrie du système à simuler. Une telle fonction peut être décrite à travers l’algorithme suivant,

- A partir de la position et de la vitesse initiale d'une particule, nous calculons l'ensemble des temps nécessaires pour rejoindre toutes les parois du système.
- Tous les temps négatifs ou supérieurs à la valeur du pas temps sont supprimés car ils représentent des temps de rencontre avec les parois physiquement impossible. Si après cette étape il ne reste aucune valeur (de temps physiquement acceptable) cela signifie que la particule ne touche aucune paroi durant le pas de temps considéré et nous la déplaçons sur la position finale qu'elle atteint compte tenu de sa vitesse et du pas de temps considéré. Si au contraire on trouve différentes valeurs possibles du temps de rencontre avec les parois, on choisit la valeur minimale car c'est elle qui correspond au temps physique nécessaire pour atteindre réellement la première paroi.
- La particule est alors déplacée jusqu'à cette paroi avec sa vitesse initiale et en utilisant le temps ainsi sélectionné. En fonction de la nature de la réflexion à la paroi (spéculaire ou maxwellienne) la vitesse est modifiée en conséquence.
- Avec la nouvelle vitesse ainsi déterminée et à partir de la nouvelle position atteinte sur la paroi, nous calculons les temps nécessaires à la particule pour joindre les autres parois du système. Les critères précédent sont à nouveau appliqués par rapport à la fraction du pas de temps restant.

Cet algorithme est illustré par un exemple simple sur la figure 3.2.

De plus, l'utilisation de calcul parallèle nécessite que le mouvement des particules soit indépendant du processeur et du domaine de calcul. Le processeur doit avoir la capacité de gérer le mouvement des particules même si la particule quitte son domaine. L'échange de particule entre processeurs ne s'effectue que lorsque la particule a terminé son mouvement. Ceci est une nécessité car une particule peut quitter son domaine de calcul d'origine puis y revenir après un rebond sur une paroi (figure 3.3).

3.4.3 Physique des rebonds : interaction particule/paroi

Voyons maintenant comment le rebond sur la paroi modifie la vitesse d'une particule. Dans notre simulation, au niveau d'une molécule, deux types de rebond sont programmés : le rebond spéculaire et le rebond diffusif. Dans le cas du rebond spéculaire la composante normale à la paroi du vecteur de vitesse post-collision (\mathbf{V}_{post}) est opposée à celle du vecteur vitesse pré-collision (\mathbf{V}_{pre})

$$\mathbf{V}_{post} = \mathbf{V}_{pre} - 2(\mathbf{V}_{pre} \cdot \hat{\mathbf{n}})\hat{\mathbf{n}}, \quad (3.3)$$

où l'opérateur « \cdot » est le produit scalaire et $\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{n}/\|\mathbf{n}\|$ et un vecteur normal à la paroi orienté vers l'intérieur du microdispositif.

En ce qui concerne le rebond diffusif, la particule se thermalise avec la paroi en perdant toutes les informations sur sa vitesse initiale. La vitesse post-collisionnelle est ici une variable aléatoire obéissant à une loi de densité de probabilité $P(V)$ de la forme

$$P(\mathbf{V}) = \frac{2}{C^4\pi} v_x e^{-\|\mathbf{V}\|^2/C^2} \quad (3.4)$$

3. MONTE CARLO

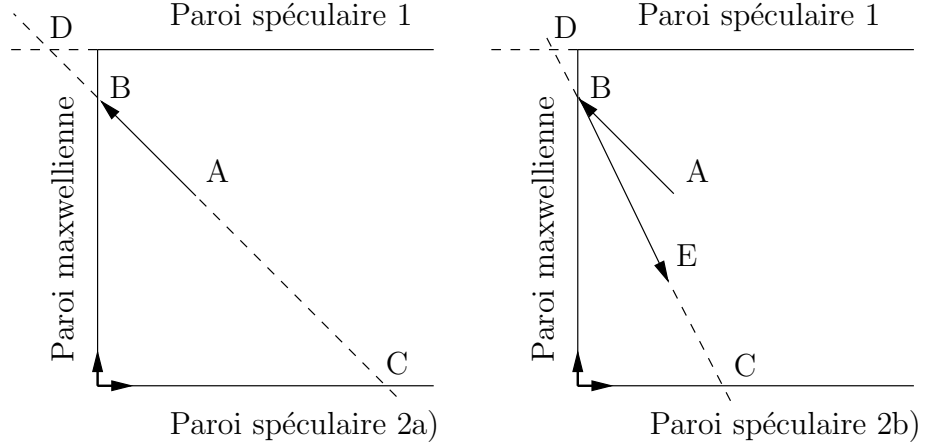


FIGURE 3.2 – Ce schéma représente sur un exemple simple l’algorithme décrit précédemment. De la position initiale (A) sur le figure 3.2a, nous calculons les temps nécessaires pour rejoindre les intersections avec les parois spéculaires t_{AC} et la paroi maxwellienne t_{AB} . Dans le cas présent le temps t_{AC} pour aller de (A) vers (C) est supprimé car il est négatif. Les deux autres temps t_{AC} et t_{AD} sont inférieurs au pas de temps, on choisit le minimum : t_{AB} . La particule avance jusqu’à la paroi en (B). Sur la paroi, avec le rebond la particule acquiert une nouvelle vitesse (figure 3.2b). Avec cette nouvelle vitesse on calcule les temps t_{BD} et t_{BC} nécessaires à la particule pour rejoindre les différentes parois. Ici, t_{BD} est négatif et t_{BC} est supérieur au pas de temps, ils sont supprimés. Par conséquent, la particule ne peut pas rencontrer de paroi durant le reste du pas temps. Pour le pas de temps considéré elle termine son mouvement en (E) et l’algorithme est terminé.

où $C^2 = 2kT/m$, T est la température de la paroi, m est la masse moléculaire de la particule et k la constante de Boltzmann. Dans le calcul exposé en annexe A, page 115, on montre que la loi (3.4) se traduit dans le cadre de notre méthode basée sur la simulation directe, par une vitesse après le rebond de la forme vectorielle suivante :

$$\mathbf{V}_{post} = C_0 \hat{\mathbf{n}} + C_1 \hat{\mathbf{t}}_1 + C_2 \hat{\mathbf{t}}_2 \quad (3.5)$$

où $\hat{\mathbf{n}}$ est toujours un vecteur normal à la paroi et $\hat{\mathbf{t}}_1$ et $\hat{\mathbf{t}}_2$ sont des vecteurs tangents à $\hat{\mathbf{n}}$ de façon à former une base orthonormée directe, et où $\hat{\mathbf{n}}$ est orienté vers l’intérieur du microdispositif. Les coefficients C_0 , C_1 et C_2 dépendent de la température de la paroi T , de la masse de la particule m et de trois nombres aléatoires Rand0, Rand1 et Rand2

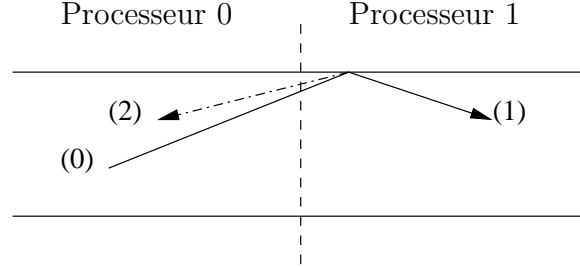


FIGURE 3.3 – Ce schéma montre la possibilité qui existe pour une particule de revenir, ou non, dans son domaine de calcul originel après un rebond sur une paroi maxwellienne. En partant de la position (0), après son rebond, la particule peut par exemple aller en (1) ou (2).

compris entre $]0,1[$:

$$\begin{aligned} C_0 &= \sqrt{-\ln(\text{Rand0})} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \\ C_1 &= \sqrt{-\ln(\text{Rand1})} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \cos(2\pi\text{Rand2}) \\ C_2 &= \sqrt{-\ln(\text{Rand1})} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \sin(2\pi\text{Rand2}) \end{aligned} \quad (3.6)$$

La littérature et nos expériences ont montré que les matériaux utilisés pour les microdispositifs ne sont pas totalement diffus. C'est pourquoi au niveau statistique on utilise une loi de réflexion de Maxwell (paroi maxwellienne). Une telle loi fait intervenir le coefficient d'accommodation α qui représente la fraction de molécules réfléchies de façon diffuse (Maxwell (1878)). Ce coefficient est compris entre 0 et 1. Au niveau d'une particule individuelle, lorsque le coefficient est égal à 0 la réflexion est spéculaire, quand le coefficient est égal à 1 la réflexion est totalement diffuse. Nos mesures ont montré qu'au niveau macroscopique, ce coefficient α est proche de 0.9. Dans notre simulation ces propriétés sont mises en oeuvre de la façon suivante : pour chaque particule on tire un nombre compris entre 0 et 1 ; quand ce nombre est inférieur à la valeur du coefficient d'accommodation α *i.e.* à 0.9, on effectue un rebond diffusif sinon on choisit un rebond spéculaire.

3.4.4 Collision avec la méthode NTC «no time counter»

On considère une cellule de volume V_{cell} occupée par N_S particules de simulation qui chacune, représente N_R molécules. La probabilité P_{col} de collision entre deux particules simulées durant un intervalle de temps Δt est égale à Bird (1994) :

$$P_{col} = N_R \sigma_T c_r \Delta t / V_{cell}, \quad (3.7)$$

A l'exception de la section efficace σ_T et de la vitesse relative c_r qui dépendent du choix de la paire de particules sélectionnées, toutes les autres quantités de l'équation 3.7 sont

3. MONTE CARLO

indépendantes du choix des particules. Le nombre total de paire de particules pouvant collisionner pour cette cellule est égal à $N_S(N_S - 1)/2$. Si nous traitons la totalité de ces collisions avec la probabilité P_{col} , la méthode serait totalement inefficace et le résultat serait incorrect. En effet,

- Cette probabilité est extrêmement faible or les nombres aléatoires obtenus par des générateurs pseudo-aléatoires ne sont pas adaptés pour sélectionner des probabilités faibles.
- Nous serions alors devant un problème de complexité N^2 qui nécessiterait un gros travail de calcul.

Pour augmenter la performance et la validité de ce processus du processus de calcul, nous procédons en deux étapes. Tout d’abord, au niveau de l’équation 3.7, nous faisons une estimation du majorant du nombre de collisions possibles $P_{col_{max}}$ pendant le temps Δt :

$$P_{col_{max}} = N_R(\sigma_{TC_r})_{max}\Delta t/V_{cell} \quad (3.8)$$

où $(\sigma_{TC_r})_{max}$ est un majorant plausible de la quantité σ_{TC_r} . On majore la quantité σ_{TC_r} par $2\sigma_T\bar{c}_r$, où \bar{c}_r est une valeur moyenne de la vitesse relative proposée par Bird (1994). Le nombre de paires à sélectionner s’obtient en multipliant l’équation 3.8 par $N_S^2/2$ qui est une bonne approximation de $N_S(N_S - 1)/2$. Cette quantité étant fluctuante au cours de la simulation, Bird (1994) propose de la remplacer par le produit de la valeur instantanée de N_S et de sa valeur moyenne temporelle \bar{N}_S . La méthode «NTC» consiste à restreindre les collisions aux particules ainsi sélectionnées,

$$N_{sel} = \frac{1}{2}N_S\bar{N}_SN_R(\sigma_{TC_r})_{max}\Delta t/V_{cell}, \quad (3.9)$$

où N_{sel} est le nombre de paires de particules sélectionnées dans la cellule durant un pas de temps.

Ensuite la procédure est la suivante. On évalue maintenant la probabilité de collision entre les particules, l’une choisie au hasard parmi les N_{sel} et l’autre parmi les particules restantes, par le rapport :

$$\frac{(\sigma_{TC_r})}{(\sigma_{TC_r})_{max}}, \quad (3.10)$$

où $(\sigma_{TC_r})_{max}$ est évalué pour chaque cellule tandis que (σ_{TC_r}) est calculé pour chacune des paires sélectionnées. Pour chaque paire de particules considérée la méthode de réjection est appliquée sur ce rapport. On peut montrer que la complexité est alors réduite à N_S . Tous ces calculs ne prennent pas en compte les positions relatives des particules. L’utilisation de sous cellules (voir paragraphe 3.2.4) a précisément pour but de pallier cet inconvénient.

3.5 Spécificité de notre simulation

La création de notre outil de simulation permet d’introduire des spécificités dans l’approche de type DSMC que nous développons. Elles concernent notamment le traitement des conditions limites à l’entrée et à la sortie du microdispositif par la création

de réservoir, la mise au point d'une fonction «zoom» et l'amélioration de l'efficacité de la parallélisation.

3.5.1 Réservoirs d'entrée et de sortie

Notre approche spécifique de Monte-Carlo permet de simuler directement le comportement des particules plutôt que d'appliquer des formules analytiques qui supposent qu'à l'entrée du microcanal les conditions d'équilibre thermodynamique sont réalisées en permanence (Nance *et al.* (1997), Wu & Tseng (2001)). Nous inspirant de la méthode de Alexeenko *et al.* (2003), nous faisons une analogie de l'expérience. L'avantage de cette méthode est qu'elle décrit une situation au plus proche de la réalité du mouvement des particules. Dans notre simulation, un microdispositif est fixé entre deux réservoirs parallélépipédiques (ou cylindriques) où la pression est supposée constante. Ces réservoirs respectent deux conditions :

- Les tailles des réservoirs sont minimisées et choisies de l'ordre de quelques libres parcours moyens de façon à ne pas augmenter exagérément le temps de calcul.
- La pression doit rester constante quelque soit la situation.

Sur le premier point, la taille des réservoirs a évolué dans une gamme s'étendant de 15 à 2.5 fois le libre parcours moyen. Cette a été minimisée pour les nombres de Knudsen les plus élevés de manière à éviter une trop grande différence entre le N_R du réservoir et celui de la première cellule du conduit. On a observé que dans cette gamme les variations de taille n'avaient pas d'incidences significatives sur les résultats. D'un point de vue géométrique ces distances correspondent au minimum à 2 fois la longueur caractéristique H du microdispositif.

Sur le deuxième point, la conservation de la pression est basée sur un algorithme simple : lors de l'initialisation les réservoirs sont mis sous pression constante ce qui correspond à un nombre initial de particules de simulation $N_S(0)$. A la fin de chaque pas de temps le nombre de particule $N_S(t)$ est compté dans les réservoirs. Si la différence entre $N_S(0)$ et $N_S(t)$ est positive, nous perdons des particules, il faut en créer de façon à compléter ce manque. A l'opposé, si ce nombre est négatif, nous avons un surplus de particules, il faut en détruire. La création et la destruction de particules se font dans la première cellule du réservoir pour le réservoir d'entrée, dans la dernière cellule du réservoir pour le réservoir de sortie. Les particules créées sont initialisées avec une position uniformément répartie dans ces cellules et avec une distribution de vitesse dont le module est égal à la vitesse thermique correspondant à la température du réservoir considéré et dont les directions sont isotropes.

On peut noter que cette adjonction au cours du processus permet d'obtenir des réservoirs de taille géométrique réduite par rapport à ce qui se passe réellement en laboratoire.

3.5.2 Fonction zoom

Dans la section 3.4.1, nous avons décrit le lien entre les particules de simulation et les molécules réelles. Ce lien a été établi au niveau de chaque cellule. Nous avons donc

3. MONTE CARLO

choisi de ne pas imposer un nombre N_R constant pour toutes les cellules. Au contraire il en résulte un nombre de particule simulée N_S qui lui reste constant d'une cellule à l'autre. A coté des avantages énumérés plus haut ce choix entraîne aussi quelques difficultés. En effet considérons deux cellules (1 et 2) caractérisées par N_{R1} et N_{R2} . Lorsqu'une particule va de la cellule 1 à la cellule 2, ce sont N_{R1} molécules qui vont dans la cellule 2. Mais dans la cellule 2 N_{R1} molécules devraient être représentées par N_{R1}/N_{R2} particules. Trois possibilités sont à envisager :

- $N_{R1} = N_{R2}$, il suffit de déterminer son nouveau numéro de cellule et de sous cellule et de la ranger.
- $N_{R1}/N_{R2} < 1$, la particule peut être détruite selon la méthode de réjection. Si la particule est conservée, alors elle est classée comme précédemment.
- $N_{R1}/N_{R2} > 1$, on classe la particule entrante et on crée autant de particules simulées que la valeur du rapport le permet. Les particules créées le sont dans la même cellule et sous cellule avec des positions différentes et la vitesse est conservée pour satisfaire la conservation de l'énergie et de l'impulsion.

L'avantage de cette méthode est que nous pouvons ordonner les cellules suivant la grandeur physique que nous voulons mesurer. Par exemple dans notre microcanal, si nous souhaitons mesurer le débit, il suffit de disposer des cellules adjacentes qui occupent toutes la section du microcanal. Inversement si nous voulons mesurer les profils de vitesses dans des sections du microcanal, nous aurons besoin de plusieurs cellules dans ces sections et chacune de ces cellules devra avoir un nombre de particules suffisant pour diminuer le bruit statistique. L'obtention de l'ensemble des profils de vitesse est donc très long en temps de calcul. C'est pourquoi, nous nous contenterons de calculer le profil de vitesse pour une unique section. Pour ce faire les cellules seront disposées dans le sens de la hauteur suivant une progression géométrique. Ce procédé permet de mettre au point un maillage local de plus en plus fin *i.e.* une fonction zoom. Ainsi, nous pouvons décomposer les sections suivant deux schémas (figure 3.4) :

1. Le premier est la décomposition du domaine en cellules adjacentes avec un nombre de sous cellule fixe (figure 3.4a).
2. La deuxième consiste à d'augmenter progressivement le nombre de cellules suivant une suite géométrique lorsque l'on change de section, tout en diminuant le nombre des sous cellules (figure 3.4b).

L'avantage de la méthode «zoom» est qu'elle permet de déterminer des profils en tout point, en limitant le plus possible le bruit statistique tout en conservant un temps de calcul raisonnable.

En effet il faut remarquer que

3.5.3 Optimisation de la parallélisation

La parallélisation de notre code bien que difficile est une nécessité pour obtenir des résultats d'une précision comparable à celle de nos résultats expérimentaux. La parallélisation n'est efficace que si nous sommes capables d'équilibrer le temps de calcul de chaque processeur. Cela est relativement facile à faire dans un code aux différences

3.5 Spécificité de notre simulation

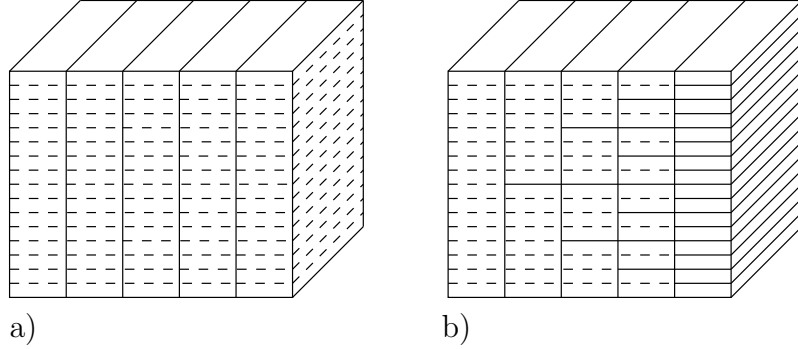


FIGURE 3.4 – Sur la figure a) le nombre de sous cellule (trait pointillé) est fixe (16) pour chaque cellule (trait plein) tandis que sur la figure b) le nombre de cellules croît et le nombre de sous-cellules décroît suivant une suite géométrique 2^n . Dans les deux cas le produit des cellules et des sous cellules est égal à 16 pour chaque tranche

finies car il suffit de diviser le domaine de calcul avec un maillage régulier. En DSMC, nous avons deux contraintes : l'une est le type de découpage en cellules, imposé par les quantités que nous souhaitons mesurer, l'autre directement liée au temps de calcul, est le nombre de particules traitées par le processeur. L'utilisation de N_R variable offre des possibilités supplémentaires de satisfaire ces impératifs. En effet on peut maintenir ainsi un nombre de particules à peu près constant par cellule, *i.e.* dans le cadre de la décomposition de la figure 3.4a une charge à peu près équivalente pour chaque processeur.

Ensuite, pour évaluer l'efficacité de la parallélisation, nous calculons le «speed up» $S_n = T_s / (T_n n)$, où T_s est le temps de calcul pour un seul processeur, et T_n et le temps du calcul parallèle pour n processeurs. Les résultats de l'efficacité de la parallélisation sont montrés sur la figure 3.5. On peut être surpris par le comportement de l'efficacité qui croît quand le nombre de processeur croît. En fait ce phénomène porte un nom, il s'agit du «super linear speedup». Il est dû à la gestion des données dans la mémoire cache intégrée (L1,L2). Lors d'un calcul parallèle, la taille totale de la cache augmente avec le nombre de processeurs. Avec une taille de la cache plus importante, les données du programme peuvent quasiment se maintenir à l'intérieur de la cache ; c'est pourquoi le temps de calcul décroît alors fortement ([Akl \(2004\)](#), [Fischer \(1991\)](#)).

Enfin dans l'optique de calculs lourds nécessitant un très grand nombre de particules (2 à 100 millions de particules), la part des communications entre les processeurs deviennent prédominantes avec l'API MPI. Il faut alors envisager une structure d'ordinateur où plusieurs processeurs peuvent gérer une mémoire partagée. Elle permet d'étendre à l'ensemble des processeurs la manipulation des objets par leur adresse y compris lors du passage d'un processeur à l'autre. Cette structure va considérablement accélérer les échanges d'informations. Nous avons donc adapté notre programme à cette architecture en utilisant l'API OpenMP (multi thread) [OpenMP \(2002\)](#). Toutefois cette structure à elle seule ne permet d'accroître indéfiniment ni le nombre de processeur ni

3. MONTE CARLO

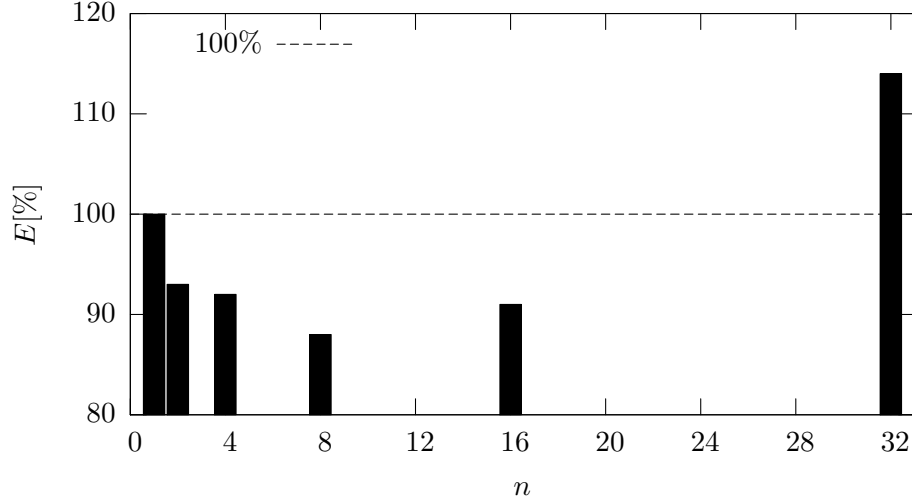


FIGURE 3.5 – Calcul d’efficacité du code parallèle.

la taille de la mémoire partagée, si bien que la combinaison des API OpenMP/MPI est la plus adaptée à l’architecture des calculateurs modernes. Le couplage des deux types d’API nous a permis d’obtenir pour l’instant 25% de gain de temps par rapport à une exécution n’utilisant que l’API MPI.

3.6 Grandeurs macroscopiques. Valeurs moyennes cumulées

L’objectif de notre simulation est d’obtenir des grandeurs macroscopiques. L’obtention de ces valeurs est difficile pour deux raisons :

- Les simulations de type DSMC sont intrinsèquement fluctuantes, elles nécessitent des calculs de valeurs moyennes cumulées, même en régime stationnaire.
- La vitesse de nos écoulements de quelques mètres par seconde est à comparer avec l’agitation thermique du gaz $\sqrt{3kT/m}$ qui est supérieur à 1300 m/s pour l’Helium à température ambiante (300 °K). On voit alors qu’il est difficile d’obtenir une précision satisfaisante sur la vitesse moyenne.

La combinaison de ces deux difficultés rend impossible la détermination de valeurs instantanées. Les valeurs macroscopiques se déterminent par une moyenne effectuée sur un grand nombre de pas de temps (Piekos & Breuer (1996), Shen *et al.* (2003)). La détermination d’une valeur se fait couramment sur plusieurs milliers de pas de temps : de 100 000 pour la pression jusqu’à la totalité du temps de la simulation pour le débit massique. Nous allons voir successivement comment sont calculés le débit massique, la pression et la vitesse.

3.6.1 Calcul du débit massique

Le calcul du débit massique s'effectue dans les réservoirs. Le nombre de particule de simulation N_{tot} qui rentrent ou qui quittent les réservoirs sont comptabilisées pendant la simulation t_{tot} . Connaissant N_R est la masse m d'une molécule réelle, on détermine facilement le débit massique Q_m :

$$Q_m = \frac{mN_{tot}N_R}{t_{tot}} \quad (3.11)$$

Le calcul du débit massique permet de déterminer si la simulation est arrivée à la phase stationnaire (état d'équilibre). Lorsque l'équilibre est atteint les débits d'entrée et de sortie convergent vers la même valeur. Sur la figure 3.6 est représentée un exemple de calcul du débit massique dans un microcanal. Le calcul s'effectue en deux temps (2 fois 2 000 000 de pas de temps) pour minimiser la perturbation engendrée par les pas de temps initiaux : en effet l'état du système obtenu à la fin du premier calcul sert de condition initiale pour le second, ce qui minimise l'influence des premiers instants sur les moyennes cumulées. Finalement dans l'exemple rapporté sur la figure 3.6 les deux débits convergent vers une valeurs commune ; $4.85 \times 10^{-12} \text{ kg/s}$ pour $Q_{m_{in}}$ et $4.86 \times 10^{-12} \text{ kg/s}$ pour $Q_{m_{out}}$.

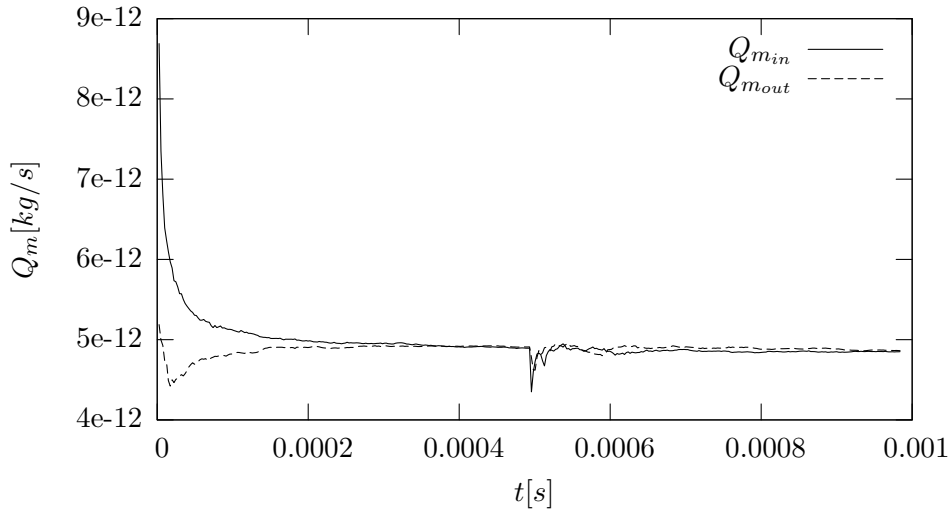


FIGURE 3.6 – Débit massique à l'entrée ($Q_{m_{in}}$) et à la sortie d'un microcanal ($Q_{m_{out}}$). La simulation s'effectue sur 4 millions de pas de temps (2 fois 2 millions), le pas de temps est égal à $2.2466 \times 10^{-10} \text{ s}$ et le nombre de particule est d'environ 196 000. Conditions initiales : $P_{in} = 2740 \text{ Pa}$, $P_{out} = 908 \text{ Pa}$, Hauteur $H = 9.38 \text{ }\mu\text{m}$, largeur $W = 20 \text{ }\mu\text{m}$, Longueur 1 mm , $Kn_m = 1.07$

Pour comparer les débits massiques obtenus par notre simulation DSMC avec nos débits expérimentaux, on commence par déterminer une règle de proportionnalité pour

3. MONTE CARLO

ramener le débit numérique Q_m à l'échelle du microcanal expérimental :

$$Q_{mc} = Q_m \frac{S_{exp} L_{num}}{S_{num} L_{exp}}, \quad (3.12)$$

On ajuste ainsi le calcul à la géométrie réelle du microsystème. Ici S_{exp} , L_{exp} sont respectivement la section et la longueur expérimentales. S_{num} , L_{num} sont respectivement la section et la longueur numériques du microcanal.

3.6.2 Calcul de la pression

La pression dans une cellule de volume unitaire (Bird (1994)) est égale à :

$$P = \frac{1}{3} \rho \overline{c'^2}, \quad (3.13)$$

où $\mathbf{c}' = \mathbf{V} - \mathbf{U}$; c' est la vitesse d'agitation thermique des particules simulées, \mathbf{U} est la vitesse macroscopique de l'écoulement enfin ρ est la densité.

De l'équation (3.13) on déduit :

$$P_{Cell} C_{Cell} = n_V kT \quad (3.14)$$

$$= N_S N_R kT \quad (3.15)$$

Ici la connaissance de la température T et le calcul de N_S permettent de connaître P_{Cell} dans chaque cellule.

3.6.3 Calcul de la vitesse

Pour chaque cellule il suffit de cumuler les vitesses moyennes des $N_{V_{Cell}}$ particules. Par exemple pour la composante longitudinale u on a :

$$u = \frac{\sum_i^{N_{V_{Cell}}} v_{x_i}}{N_{V_{Cell}}} \quad (3.16)$$

Encore une fois étant données les faibles vitesses de nos écoulements, nous devons effectuer le calcul cumulé de la vitesse sur de très nombreux pas de temps (10^6). Ce calcul s'effectue pour chaque direction cependant c'est la composante u de la vitesse macroscopique suivant x que l'on étudiera notamment suivant sa coordonnée y . En effet la composante v de la vitesse macroscopique suivant y est négligeable.

3.7 Validation

3.7.1 Similitude

Le dispositif utilisé pour la simulation est assez différent du dispositif expérimental mis en oeuvre au laboratoire. La simulation d'un dispositif de taille réelle serait extrêmement coûteuse en temps de calcul. C'est pourquoi nous avons utilisé des règles de

similitude basées sur les formules analytiques établies en régime de glissement (voir chapitre 2). Nous avons ensuite vérifié par quelques tests numériques que ces règles étaient encore approximativement vérifiées (avec un écart de 3 % environ) en régime de transition et en régime moléculaire libre. Le dispositif finalement retenu pour la simulation est caractérisé par la vraie dimension caractéristique qui est sa hauteur H ($9.38 \mu m$), mais sa longueur L est choisie égale à $1 mm$ au lieu de $9.39 mm$ pour le dispositif expérimental. D'autre part la largeur du dispositif utilisée est de $20 \mu m$ au lieu de $492 \mu m$ mais le traitement des parois verticales est tel que le calcul est conduit ici comme si le dispositif était de largeur infinie (parois latérales spéculaires).

3.7.2 Tests de validation

Sur ce dispositif nous avons procédé à la validation de notre code en comparant nos résultats à ceux qui ont été obtenus par d'autres méthodes dans des conditions considérées ici comme des cas tests. On a fait appel à deux séries de comparaison.

- La comparaison de nos profils de pression avec ceux obtenus en régime de glissement par la méthode NS continue.
- La comparaison des profils de vitesse u (donnés suivant y) avec les résultats adimensionnés obtenus par [Ohwada et al. \(1989\)](#) en résolvant l'équation de Boltzmann linéarisée.

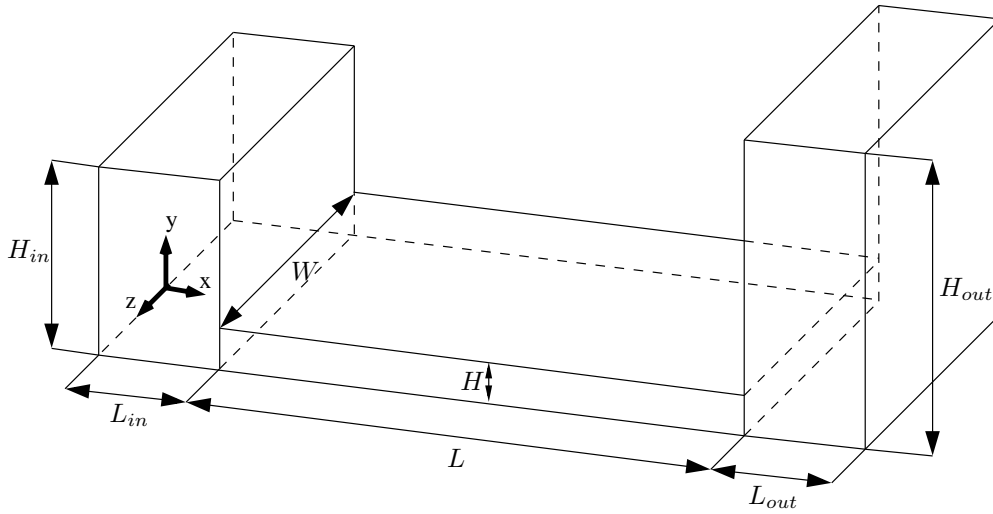


FIGURE 3.7 – Shéma du microcanal simulé dans nos expériences numériques. A l'exception des parois latérales qui sont spéculaires, les autres parois sont maxwelliennes.

Profil de Pression

Sur la figure 3.8 nous présentons l'étude du profil de pression suivant x , obtenu avec notre code. Les conditions expérimentales sont une pression aval de $2.593 \times 10^4 Pa$, une

3. MONTE CARLO

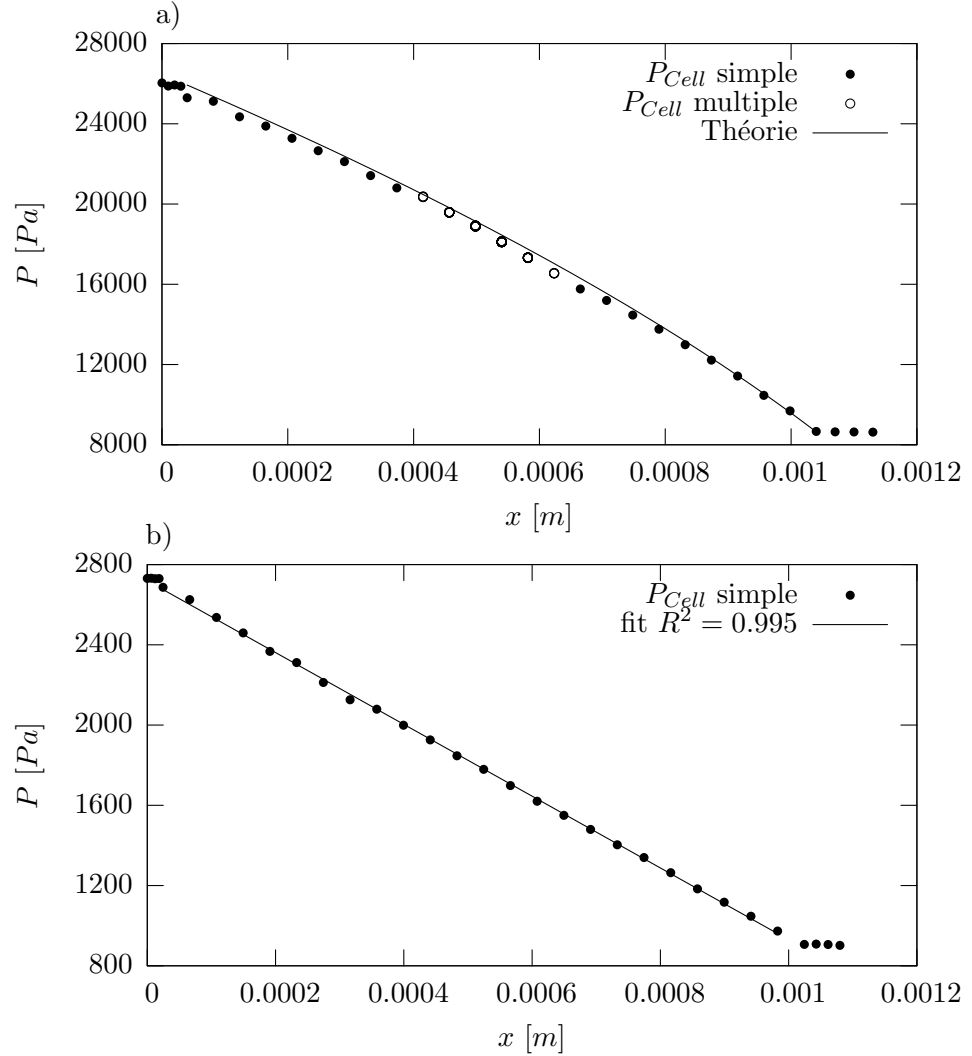


FIGURE 3.8 – Pression moyennée à l’intérieur d’un microcanal sur 100 000 pas de temps pour $Kn = 0.1$ a) et $Kn = 1.0$ b). a) Les cercles pleins indiquent qu’il n’y a qu’une seule cellule dans la section. Les cercles «vide» indiquent qu’il y a plusieurs cellules dans la section (4,16,64). Enfin le profil de pression théorique provient de l’équation (2.11) réduite au premier ordre. b) Pour ce calcul, il n’y a qu’une seule cellule par section, les points ont été approximés par une droite du type $y = ax + b$, où $a = -178902 \times 10^{-6}$ et $b = 2719$, le coefficient statistique $R^2 = 0.995$ indique la linéarité de la pression dans le microcanal pour ce régime d’écoulement.

pression amont 8.643×10^3 Pa, une température de $295K$, une accommodation totale à la paroi pour $Kn = 0.1$. Le nombre de cellules est de 32 dans le sens de la longueur et jusqu’à 64 dans la section du microcanal. La comparaison théorique s’effectue avec l’équation (2.11) réduite au premier ordre qui provient de la résolution des équations

NS. L'accord est globalement très bon. Or il est habituel de considérer que pour un écoulement isotherme à $Kn = 0.1$ le modèle continu (avec conditions de glissement) donne des résultats corrects. Par conséquent on peut considérer que la comparaison présentée sur la figure 3.8a valide globalement notre méthode notamment sur les points méthodologiques évoqués précédemment : le maintien de la pression dans les réservoirs par rapport aux conditions initiales, le N_S variable tout le long du tube et la fonction zoom, en effet :

- La variation de la pression n'excède pas 0.5 % dans les réservoirs d'entrée et de sortie.
- Le N_R variable n'entraîne pas comportement aberrant.
- L'influence de la fonction zoom sur la pression n'est pas visible : en effet sur les points centraux (cf fig. 3.8a, on a fait varier le nombre de cellules utilisées pour un même x (jusqu'à 64) : on constate que dans toutes les cellules d'une même section la pression reste la même, quelque soit le choix du maillage.

Par ailleurs sur la figure 3.8b, pour $Kn = 1$, on retrouve un profil linéaire de pression souvent évoqué dans la littérature.

Un point reste pourtant à commenter. Il s'agit des petits sauts de pressions visibles à l'entrée et à la sortie du microcanal. Ces sauts sont certainement dûs au maillage des réservoirs. En effet, les réservoirs sont composés de quatre cellules subdivisées en 32 sous cellules. Les effets physiques de l'écoulement sont bien pris en compte par les collisions dans les sous cellules mais les calculs des valeurs macroscopiques (pression, vitesse) qui s'effectuent sur la cellule induisent une moyenne de la pression ou de la vitesse alors que ces grandeurs ne sont pas nécessairement constantes sur la totalité de la cellule.

Profil de vitesse

Dans ce deuxième type de comparaison nous nous intéressons au profil de la vitesse u dans la sens de la hauteur y . Le microcanal simulé est le même que celui sur la figure 3.7. Les «conditions expérimentales» sont les mêmes que dans les figures 3.6 et 3.8, *i.e.* $P_{in} = 2740 \text{ Pa}$, $P_{out} = 908 \text{ Pa}$ pour le figure 3.6 et $P_{in} = 2.593 \times 10^4 \text{ Pa}$, $P_{out} = 8.643 \times 10^3 \text{ Pa}$ pour le figure 3.6. Dans les deux cas l'accommodation à la paroi est totalement diffuse. Ces deux études correspondent à deux nombres de Knudsen différents respectivement 0.1 (régime de glissement) et 1 (régime de transition). La configuration des cellules relève de la représentation multiple présentée dans la section 3.5.2. Nous comparons les profils de vitesses avec les solutions de l'équation de Boltzmann linéarisée obtenues par Ohwada *et al.* (1989) avec le modèle hard-sphère et, pour des parois supposées totalement diffuses.

Les auteurs de cette étude ont admis que le gradient de pression adimensionné de l'équation (2.18) $\nu_{ca} = \frac{H}{P} \frac{dP}{dx}$ est petit devant 1 ce qui est généralement vérifié. Les profils de vitesses de Ohwada *et al.* (1989) ne sont donnés que pour une forme adimensionnée $\frac{u}{\nu\sqrt{2RT}}$, où le gradient de pression adimensionné ν_{ca} reste inconnu, (par conséquent, cette validation permet seulement de comparer des profils adimensionnés. Les comparaisons entre ce modèle et nos simulations DSMC sont présentées sur les figures 3.9a

3. MONTE CARLO

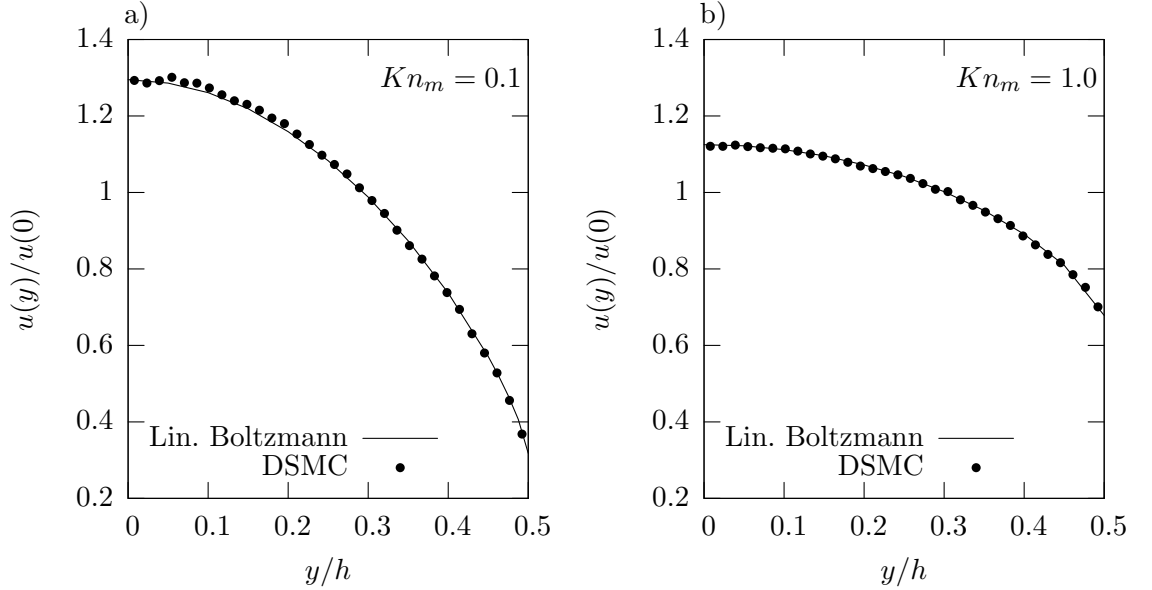


FIGURE 3.9 – Comparaison de profils de vitesses obtenu avec notre DSMC au centre du microcanal avec la linéarisation de l'équation de Boltzmann (Ohwada *et al.* (1989)), dans les deux cas l'accommodation à la paroi est totale, sur la figure a) $Kn_m = 0.1$ tandis que $Kn_m = 1.0$ sur la figure b).

et 3.9b. Les résultats sont en parfait accord. Cet accord peut sembler *a priori* surprenant car l'une des hypothèses de Ohwada *et al.* (1989) est que le gradient de pression longitudinal est uniforme, or particulièrement pour le cas où $Kn = 0.1$, l'analyse du gradient de pression de la figure 3.8a montre que ce n'est pas le cas (cette non linéarité est en accord avec la théorie continue en régime de glissement *cf* équation (2.11)). Mais a y regarder de plus près la contradiction n'est ici qu'apparente. En effet les grandeurs portées en 3.9 sont, comme on l'a dit plus haut, des quantités adimensionnées ; la vitesse de référence $u(0)$ représente en fait la vitesse locale sur l'axe, proportionnelle au gradient local $\frac{H}{P} \frac{dP}{dx}$. Si on se rapporte à l'expression analytique de la vitesse donnée en (2.8) on constate que -au moins en régime de glissement- cette quantité adimensionnée ne dépend plus du gradient local.

Par ailleurs, pour le cas où $Kn = 1.0$, la figure 3.8b montre que le pression est uniforme dans le microconduit : et l'hypothèse de Ohwada *et al.* (1989) n'est donc pas contredite ici. Mais la discussion précédente a clairement montré que la validation résultant des figures 3.9 porte surtout sur la dépendance en y mais n'apporte pas de preuve décisive sur la dépendance de la vitesse en x puisque le gradient de pression qui dépend de x a disparu de la quantité adimensionnée $u(y)/u(0)$.

3.7.3 Conclusion

D'importants éléments qui concourent à la validation de notre simulation Monte-Carlo sont apportés par la double comparaisons simulation/théorie présentées ci-dessus. La fonction zoom et la représentation variable qui lui est associée, sont des outils très puissants. Les possibilités de cette fonction sont nombreuses ; cependant nous ne nous sommes intéressés qu'aux maillages des sections situées vers le milieu du microcanal pour obtenir les profils de vitesses.

Dans les prochains chapitres, notre simulation sera utilisée comme un prolongement de nos expériences de laboratoire. Là où l'expérience ne peut pas donner de résultat pour l'instant, la simulation de Monte Carlo sera associée à des paramètres expérimentaux. Ainsi, la simulation sera centrée sur l'étude des profils de vitesses pour des nombres de Knudsen allant de 0.1 à 0.3 avec des coefficients d'accommodations «expérimentaux» à déterminés dans le régime glissement.

Chapitre 4

Résultats dans les microtubes

La plupart des mesures effectuées ici portent sur des nombres de Knudsen moyens compris dans $[0 - 0.3]$. Ces expériences ont été réalisées pour différents gaz : hélium, argon, xénon et azote dans des tubes en silice de différents diamètres. On verra que dans un tel domaine de Knudsen, on peut considérer que le régime de glissement se prolonge. Par ailleurs, pour l'un des tubes ($D = 50 \mu m$) le domaine de Knudsen exploré est étendu bien au delà du régime de glissement et du régime de transition jusqu'au moléculaire libre proche ($Kn \leq 30$).

D'une manière générale les résultats sont regroupés en différentes séries qui correspondent à des rapports de pressions \mathcal{P} à peu près constants. On a retenu $\mathcal{P} = 3, 4$ et 5 essentiellement.

Enfin la première série d'expériences qui porte sur l'azote en régime de glissement dans un tube de $25 \mu m$ a servi de test pour valider la nouvelle méthode de mesure que nous avons mise en oeuvre et qui est décrite au chapitre 1.

4.1 Résultats pour différents gaz et différents diamètres en régime de glissement

On sait que pour des nombres de Knudsen de l'ordre de 0.1, l'approche continue basée sur les équations de NS doit être complétée par des conditions aux limites de glissement généralement du premier ordre suivant le nombre de Knudsen. Se pose ensuite la question de savoir si en augmentant l'ordre de ces conditions limites (par exemple en passant au deuxième ordre¹) on peut prolonger encore le domaine de validité de l'approche continue. D'une façon générale le problème de la caractérisation de l'ordre du régime de glissement comporte deux volets. Il s'agit de déterminer :

1. à partir de quelles valeurs du Knudsen moyen le deuxième ordre est plus pertinent que le premier ordre.

1. Un traitement vraiment cohérent du deuxième ordre devrait concerner aussi les équations de conservations mais on considère généralement que dans les systèmes présentant une symétrie ces effets de second ordre qui prennent naissance loin de la paroi (cf. équations de Burnett) sont négligeables devant ceux qui proviennent de la paroi (Cercignani (1964)).

4. RÉSULTATS DANS LES MICROTUBES

2. jusqu'où on peut prolonger la gamme des nombres de Knudsen relevant d'une approche continue du deuxième ordre.

Dans ce chapitre étant donné que l'investigation du régime de glissement se limite *a priori* à l'intervalle $[0 - 0.3]$ nous n'examinons vraiment que la première partie de la question. En effet on peut constater qu'aucun Knudsen local ne peut dépasser 1 le long du conduit et que, d'autre part, les termes d'un ordre égal ou supérieur à trois en Knudsen restent globalement négligeables ($3 \cdot 10^{-2}$). Par conséquent le second ordre paraît suffire *a priori* pour couvrir la gamme de Knudsen explorée ici. Par contre la question de la limitation du domaine modélisé par le second ordre se posera différemment au chapitre suivant. Dans les microcanaux, on verra que l'analyse de cette question confortera les commentaires précédents, à savoir qu'une borne supérieure en Knudsen de 0.3 paraît raisonnable comme limite supérieure de validité pour une approche continue du second ordre.

4.1.1 Tube de 25 μm

La première campagne expérimentale de mesure de débits a été conduite dans un tube de 24.6 μm de diamètre (voir tableau 1.2 page 18 pour les caractéristiques), du régime hydrodynamique jusqu'au régime de glissement, *i.e.* pour un nombre de Knudsen variant de 0 à 0.3. Les gaz utilisés sont l'azote, l'argon et l'hélium. Cette première série d'expériences nous a permis de valider notre méthode de mesure de pression dite à «volume constant», voir paragraphe 1.2.3, en comparant ces résultats à ceux donnés par la méthode de la goutte éprouvée dans la littérature et dite à «pression constante» (voir paragraphe 1.2.3). Cette dernière, depuis Harley *et al.* (1995) si l'on excepte le travail de Lalonde (2001) n'avait été utilisée que pour des pressions supérieures à 4800 Pa, ce qui correspond à des débits massiques supérieurs à ceux considérés dans nos expériences. En ce qui nous concerne nous avons utilisé la méthode de la goutte pour des débits aussi bas que possible non sans quelques difficultés. Nous avons par ailleurs développés la méthode dite «de pression» sur des bases assez nouvelles en l'associant à de nouveaux détecteurs de pression beaucoup plus performants que ceux utilisés jusque là. Ces nouvelles conditions d'utilisations ont permis d'atteindre des débits compris entre 10^{-9} et 10^{-13} kg/s.

D'une méthode à l'autre

Les conditions expérimentales des expériences effectuées dans ce microtube sont données dans la table 4.1. Nos premières mesures de débit massiques de l'azote ont eu pour but de valider la nouvelle méthode de pression. C'est pourquoi, nous avons effectué des expériences couplées pour des conditions expérimentales identiques sur plusieurs points de mesure avec les deux méthodes. La courbe donnée dans la partie supérieure de la figure 4.1 présente la comparaison de débits massiques obtenus avec les deux méthodes de mesure sur une même plage de nombre de Knudsen ($Kn_m \in [0, 0.1]$). La solution analytique de l'équation (2.14) pour un rapport de pression $\mathcal{P} = 4.7$ est aussi tracée sur cette figure. Les erreurs expérimentales n'y sont pas visibles en raison

de l'échelle logarithmique. En comparant les résultats des deux méthodes de mesures, nous pouvons conclure à un bon accord entre les deux méthodes. De plus la solution analytique de NS avec des conditions limites d'ordre 2 est également en bon accord avec les résultats expérimentaux. On a donc considéré ces résultats comme un test de validité de la nouvelle méthode de mesure dite «de pression».

Dans la suite de ce travail nous n'avons utilisé que la méthode de pression dite à volume constant parce que elle permettait des mesures plus faciles à réaliser et plus reproductibles surtout pour les faibles débits.

Premier aperçu des effets de second ordre

Sur la figure 4.1 la courbe inférieure représente les débits massiques expérimentaux obtenus avec les deux méthodes mais sur une gamme de Knudsen moyen étendue ($Kn_m \in [0 - 0.3]$), avec néanmoins une prédominance des points provenant de la méthode dite «de pression». Les barres d'erreurs expérimentales obtenues pour les deux méthodes sont quasiment les mêmes ($\pm 4.2\%$ pour la méthode de la goutte et $\pm 4.5\%$ pour la méthode de la pression). Les résultats sont présentés sous une forme adimensionnée semblable à celle de l'équation (2.16). Deux solutions analytiques approchées des équations NS sont aussi tracées. La première solution utilise la condition limite de glissement du premier ordre (équation (2.1)) avec le coefficient $\sigma_{2p} = 0$. Le coefficient de glissement σ_p est égal à 1.016, qui est la valeur obtenue par Cercignani & Daneri (1963) avec l'hypothèse d'une réflexion complètement diffuse et en tenant compte de l'influence de la couche de Knudsen. La deuxième solution analytique des équations NS est obtenue avec une condition limite du second ordre (équation (2.1)). Le coefficient σ_p est toujours égal à 1.016, et pour le deuxième coefficient de glissement on a utilisé la valeur théorique obtenue par Cercignani (1964) qui est égale à 0.7667. Ces deux solutions sont calculées pour $\mathcal{P} = 4.75$. La figure semble montrer la présence d'effets du second ordre pour la gamme de Knudsen considérée. L'utilisation des équations NS avec des conditions du premier ordre sousestime le débit mesuré tandis que l'utilisation de la condition limite théorique du second ordre le surestime. Ce résultat amène deux commentaires :

1. Un effet du second ordre semble bien être présent, il nécessite une investigation plus poussée notamment au niveau de la détermination des coefficients.
2. En effet on constate que les modèles proposés ne rendent pas réellement compte de l'allure expérimentale.

Analyses différentielles des résultats : effets du premier et du second ordre

Les données expérimentales sont interpolées au sens des moindres carrés suivant la méthode proposée dans Maurer *et al.* (2003) par un polynôme du premier et du second

4. RÉSULTATS DANS LES MICROTUBES

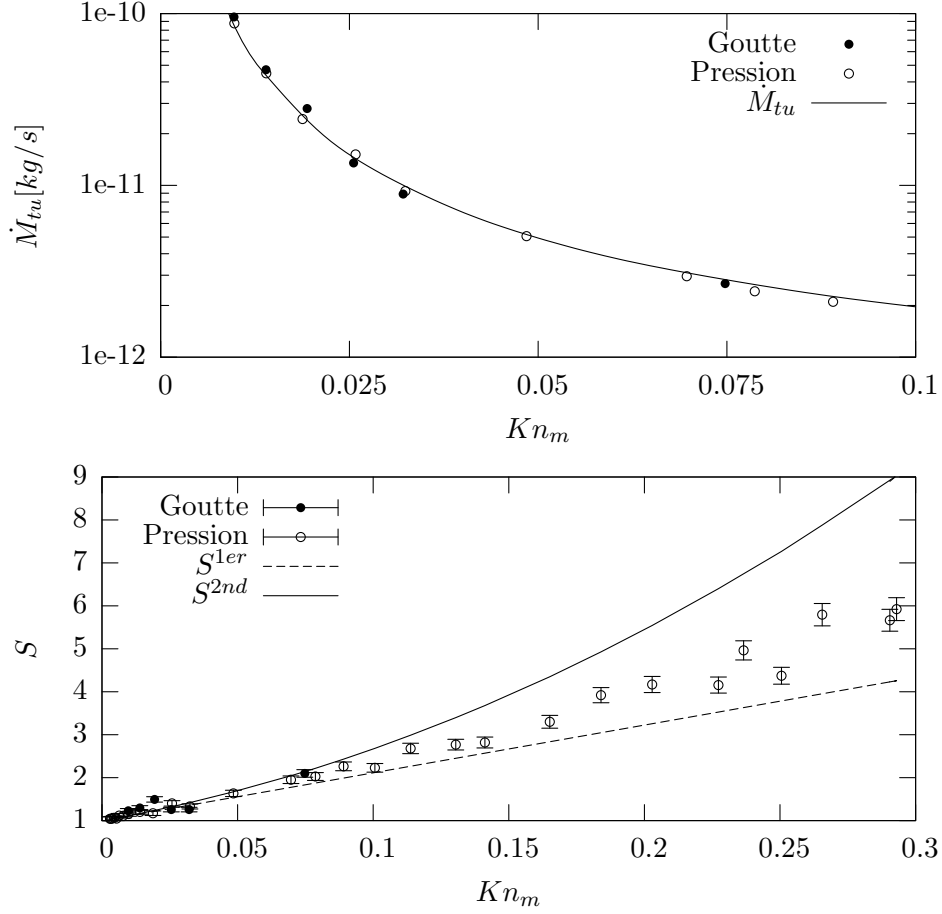


FIGURE 4.1 – Mesures de débits d’azote en régime de glissement. Sur la figure du haut sont présentées les deux techniques de mesures ainsi que le débit massique théorique au second ordre provenant de l’équation (2.14). Sur le figure du bas sont représentés les débits théoriques et expérimentaux adimensionnés selon l’équation (2.16).

degré en Kn_m (figure 4.2) de la forme :

$$S_f^{exp} = 1 + A_i^{exp} Kn_m + B_i^{exp} Kn_m^2, \quad i = [1, 2], \quad (4.1)$$

où l’indice i correspond à l’ordre du polynôme. Pour une approximation du premier ordre le coefficient B_1^{exp} est évidemment égal à 0. Les coefficients A_i^{exp} et B_i^{exp} sont obtenus à l’aide de l’algorithme non linéaire des moindres carré de Marquard-Levenberg utilisé ici pour les mesures de débits adimensionnés :

$$S^{exp} = \dot{M}_{tu}^{exp} \left/ \frac{\pi D^4 \Delta P P_m}{128 \mu R T L} \right. \quad (4.2)$$

L’estimation des erreurs commises sur la détermination de ces coefficients est proportionnelle à l’écart type résiduel. Ces mesures et leurs traitements statistiques sont

4.1 Régime de glissement en microtubes

Gaz	Azote		Argon		Hélium	
	<i>Min</i>	<i>Max</i>	<i>Min</i>	<i>Max</i>	<i>Min</i>	<i>Max</i>
$\mathcal{P}_{Th} = 5$						
Pression in [<i>Pa</i>]	1218.8	121072.	1192.5	120091.	3645.6	125142
Pression out [<i>Pa</i>]	245.02	24709	240.25	23999.	727.14	25368.
Knudsen moyen Kn_m	0.0029	0.289	0.0030	0.3117	0.0091	0.31
\mathcal{P}_E expérimental	4.73	5.02	4.90	5.01	4.88	5.04
\mathcal{P}_C centré	4.87		4.96		4.96	
$\mathcal{P}_{Th} = 4$						
Pression in [<i>Pa</i>]	-	-	1262.5	120302.	3634.4	101218.
Pression out [<i>Pa</i>]	-	-	306.	30244.	922.25	25445
Knudsen moyen Kn_m	-	-	0.029	0.28	0.01	0.3
\mathcal{P}_E expérimental	-	-	3.93	4.05	3.91	4.04
\mathcal{P}_C centré	-		3.99		3.98	
$\mathcal{P}_{Th} = 3$						
Pression in [<i>Pa</i>]	-	-	-	-	3324.8	101148.6
Pression out [<i>Pa</i>]	-	-	-	-	1114.8	3369.7
Knudsen moyen Kn_m	-	-	-	-	0.01	0.3
\mathcal{P}_E expérimental	-	-	-	-	2.91	3.05
\mathcal{P}_C centré	-		-		2.98	

TABLE 4.1 – Conditions expérimentales pour le tube de $25 \mu m$. \mathcal{P}_{Th} représente le ratio de pression P_{in}/P_{out} désiré, \mathcal{P}_E est le rapport de pression expérimental et \mathcal{P}_C est la moyenne du ratio \mathcal{P}_E . C'est pression correspondent à un nombre de Knudsen moyen compris entre [0-0.3]

effectués ici pour les trois gaz cités plus haut : hélium, argon et azote.

Il est bien connu que les effets du second ordre existent en régime de glissement et que leurs influences deviennent de plus en plus significatives quand la raréfaction augmente. Pour évaluer la pertinence de l'approximation polynomiale du premier et du second ordre sur l'intervalle de Knudsen [0 – 0.3], nous calculons d'abord deux paramètres statistiques importants :

- le coefficient de détermination r^2 (comme il est défini dans tout logiciel de traitement de données ; Matlab par exemple),
- la somme des résidus $s_r = \sqrt{\frac{1}{n-p} \sum_{j=1}^n e_j^2}$ (où n est le nombre de points de mesure, p le degré du polynôme de l'interpolation et $e_j = S_j^{exp} - S_{f_j}^{exp}$ la différence locale entre la donnée expérimentale et la valeur de l'approximation polynomiale).

Ces coefficients sont donnés dans la table 4.2. Leur analyse montre que le coefficient de détermination r^2 des trois gaz est plus proche de 1 pour une modélisation du second ordre que pour une modélisation du premier ordre. Pour l'hélium la différence est moins nette entre les deux modélisations. La valeur de la somme des résidus s_r confirme cette analyse : en effet on voit bien que sur [0 – 0.3] cet écart est plus faible pour la représentation du second ordre.

Comme on peut le constater l'analyse des coefficients statistiques relevant des deux

4. RÉSULTATS DANS LES MICROTUBES

\mathcal{P}_{Th}	Kn_m	A_1^{exp}	A_2^{exp}	B_2^{exp}	s_r	r^2
Azote						
5	[0 – 0.3]	15.49 ± 0.31	-	-	0.2115	0.9779
5	[0 – 0.3]	-	11.67 ± 0.97	16.63 ± 4.06	0.1932	0.9859
5	[0 – 0.1]	13.10 ± 0.27	-	-	0.0501	0.9871
5	[0 – 0.1]	-	13.29 ± 1.08	-2.45 ± 12.99	0.0527	0.9872
Argon						
5	[0 – 0.3]	18.18 ± 0.39	-	-	0.2903	0.9691
5	[0 – 0.3]	-	13.22 ± 0.80	24.27 ± 3.70	0.1940	0.9863
5	[0 – 0.1]	14.68 ± 0.26	-	-	0.0702	0.9837
5	[0 – 0.1]	-	15.80 ± 1.09	-13.31 ± 12.49	0.0700	0.9846
4	[0 – 0.3]	18.29 ± 0.28	-	-	0.2000	0.9862
4	[0 – 0.3]	-	13.68 ± 0.51	22.87 ± 2.44	0.1026	0.9965
4	[0 – 0.1]	14.69 ± 0.40	-	-	0.0645	0.9809
4	[0 – 0.1]	-	9.43 ± 0.55	68.86 ± 6.98	0.0250	0.9973
5-4	[0 – 0.3]	18.23 ± 0.24	-	-	0.2495	0.9775
5-4	[0 – 0.3]	-	13.42 ± 0.49	23.70 ± 2.31	0.1553	0.9914
5-4	[0 – 0.1]	14.68 ± 0.21	-	-	0.0670	0.9840
5-4	[0 – 0.1]	-	13.85 ± 0.84	10.17 ± 9.92	0.0669	0.9844
Hélium						
5	[0 – 0.3]	12.99 ± 0.15	-	-	0.1315	0.9915
5	[0 – 0.3]	-	10.81 ± 0.37	9.15 ± 1.5	0.0876	0.9959
5	[0 – 0.1]	11.76 ± 0.27	-	-	0.0574	0.9788
5	[0 – 0.1]	-	10.52 ± 0.92	15.26 ± 10.93	0.0557	0.9814
4	[0 – 0.3]	12.41 ± 0.10	-	-	0.0786	0.9956
4	[0 – 0.3]	-	10.85 ± 0.16	7.05 ± 0.68	0.0352	0.9991
4	[0 – 0.1]	11.30 ± 0.11	-	-	0.0246	0.9959
4	[0 – 0.1]	-	11.27 ± 0.39	0.31 ± 4.44	0.0256	0.9959
3	[0 – 0.3]	12.82 ± 0.18	-	-	0.1340	0.9894
3	[0 – 0.3]	-	10.62 ± 0.41	9.43 ± 1.7	0.0875	0.9957
3	[0 – 0.1]	12.04 ± 0.25	-	-	0.0406	0.9875
3	[0 – 0.1]	-	10.90 ± 0.72	15.76 ± 9.33	0.0373	0.9905
5-3	[0 – 0.3]	12.75 ± 0.09	-	-	0.1213	0.9908
5-3	[0 – 0.3]	-	10.70 ± 0.21	8.87 ± 0.83	0.0781	0.9962
5-3	[0 – 0.1]	11.63 ± 0.13	-	-	0.0455	0.9853
5-3	[0 – 0.1]	-	11.11 ± 0.43	6.51 ± 5.125	0.0452	0.9858

TABLE 4.2 – A_i^{exp} , B_i^{exp} , s_r et r^2 obtenus par une approximation polynomiale du premier degré ($i = 1$) ou du second degré ($i = 2$) pour $D = 25 \mu m$.

approches révèle parfois des différences minimales. C'est pourquoi nous complétons notre travail par une analyse graphique basée sur le tracé des résidus. Les résidus e_i sont tracés (figure 4.3) en fonction du nombre de Knudsen moyen. L'analyse de la distribution des points étudiés montre que les résidus pour une modélisation du second ordre sont équidistribués le long de l'axe des abscisses, tandis que pour une modélisation du premier ordre, pour l'azote et l'argon, les résidus sont négatifs de 0 à 0.2, puis ils redeviennent positifs de 0.2 à 0.3. Cette analyse graphique des résidus conforte notre choix en faveur d'une modélisation avec des conditions limites du second ordre. Notons enfin que pour l'hélium cette différence d'allure entre les distributions des résidus est moins marquée mais existe aussi.

Enfin la comparaison de l'erreur expérimentale (4.5 %) de la méthode de pression, avec l'erreur statistique de l'approximation polynomiale ($\sqrt{\frac{1}{n-p} \sum e_i^2 / S_m^{exp}}$, où S_m^{exp} est la valeur moyenne des données mesurées) donne respectivement 9.5 % et 7.5 % pour le premier et le second ordre. Nous trouvons à nouveau que la modélisation du second ordre est meilleure que celle du premier ordre puisque son erreur statistique reste plus proche de l'erreur expérimentale. Le fait que l'erreur statistique soit néanmoins supérieure à l'erreur expérimentale n'invalide pas le résultat car il faut rappeler que l'erreur expérimentale telle qu'elle est calculée ici ne prend pas en compte l'erreur sur le diamètre qui s'introduit dans le passage des valeurs mesurées Q_m (1.5) aux valeurs des débits normalisés S^{exp} (4.2) sur lesquels porte l'étude statistique.

Pour parachever cette analyse, nous comparons la validité des interpolations polynomiales sur différents intervalles de Knudsen (voir table 4.2). Pour l'intervalle de Knudsen le plus faible $[0-0.1]$ l'approximation du premier ordre est suffisante. Dans cette gamme de Knudsen l'approximation du second ordre n'est pas pertinente car les incertitudes sur les coefficients du second ordre sont grandes. L'écart entre le coefficient du premier ordre A_1 obtenu pour l'approximation du premier degré sur l'intervalle $[0-0.1]$ et le coefficient correspondant A_2 obtenu pour une approximation du second ordre sur l'intervalle $[0-0.3]$ est acceptable car il est pratiquement compris dans les barres d'erreurs. Ainsi sur $[0-0.1]$ la modélisation du premier ordre est préférable, tandis que sur $[0-0.3]$ les critères définies plus haut indiquent clairement que la modélisation du second ordre est nettement meilleure.

Par la suite, l'analyse plus poussée des coefficients expérimentaux du premier et du second ordre sera faite. Nous en tirerons ensuite des coefficients qui ont une signification théorique précise (coefficient de glissement et coefficient d'accommodation). Cette analyse ne concernera que l'intervalle de Knudsen $[0-0.3]$ qui est le plus intéressant.

Effet du premier ordre en régime de glissement

En identifiant l'expression théorique donnée par l'équation (2.17) avec la forme expérimentale polynomiale donnée en (4.1), nous obtenons une expression des coefficients A_1 puis de σ_p^i :

$$A_1 = \frac{\sigma_p^i}{k_\lambda} = \frac{A_i^{exp}}{8}. \quad (4.3)$$

4. RÉSULTATS DANS LES MICROTUBES

\mathcal{P}_{Th}	σ_p^{1er}	α_M^{1er}	σ_p^{2nd}	α_M^{2nd}	σ_{2p}
Azote					
5	1.415 ± 0.028	0.770 ± 0.010	1.066 ± 0.088	0.908 ± 0.041	0.231 ± 0.057
Argon					
5	1.554 ± 0.034	0.726 ± 0.010	1.130 ± 0.068	0.879 ± 0.029	0.294 ± 0.045
4	1.564 ± 0.023	0.723 ± 0.008	1.169 ± 0.044	0.862 ± 0.018	0.290 ± 0.031
5 – 4	1.558 ± 0.021	0.725 ± 0.007	1.147 ± 0.042	0.871 ± 0.017	0.294 ± 0.029
Hélium					
5	1.277 ± 0.014	0.819 ± 0.005	1.062 ± 0.036	0.910 ± 0.017	0.147 ± 0.024
4	1.193 ± 0.036	0.852 ± 0.014	1.066 ± 0.015	0.908 ± 0.008	0.118 ± 0.011
3	1.260 ± 0.018	0.826 ± 0.007	1.044 ± 0.040	0.918 ± 0.018	0.166 ± 0.030
5 – 3	1.252 ± 0.009	0.829 ± 0.004	1.052 ± 0.020	0.914 ± 0.009	0.148 ± 0.014

TABLE 4.3 – Les coefficients expérimentaux σ_p^i et σ_{2p} sont obtenus à partir des coefficients de la table 4.2, α_M est le coefficient de glissement utilisant le formalisme de Maxwell (équation (2.5)).

La signification théorique du coefficient σ_p^i où i représente l'ordre des conditions limites retenues (1er ou 2nd), a été donnée dans le chapitre 2 ainsi que celles de α_M^i et α_L^i . Leurs expressions ont été données respectivement en (2.5) et (2.6). Les calculs des différents coefficients seront effectués maintenant sur l'intervalle $[0 - 0.3]$ qui est l'intervalle étudié. Le modèle d'interaction moléculaire retenu ici est celui des sphères rigides variables (VHS) décrit dans le chapitre 2.

Si nous comparons nos coefficients expérimentaux de glissement σ_p^{2nd} ($1.044 \leq \sigma_p^{2nd} \leq 1.169$) avec les résultats théoriques de la table 2.2 ($\sigma_p = 1.012$ pour Kogan (1969), $\sigma_p = 1.016$ pour Albertoni *et al.* (1963) et Cercignani (1964)), nous constatons une différence allant de 3% à 10% avec les valeurs théoriques. Cette différence peut s'expliquer par le fait que les expressions théoriques sont obtenues pour une accommodation totale à la paroi, or, nous verrons que nos résultats remettent en question cette hypothèse. On peut évoquer aussi pour expliquer ces différences le fait que le modèle BGK est un modèle phénoménologique qui implique un nombre de Prandtl incorrect et qui n'assure pas toujours l'exactitude quantitative des paramètres physiques calculés.

Le tableau 4.3 montre aussi que les coefficients du premier ordre σ_p et particulièrement σ_p^{2nd} qui est le coefficient pertinent dans le cadre de l'approche du second ordre, sont différents pour tous les gaz et peu sensibles aux rapports de pressions (les différences observées sont inférieures aux erreurs expérimentales). On peut faire la même remarque pour les coefficients α_M^{2nd} . Il faut ajouter encore que l'expression de α_M donnée par l'équation (2.5) établie par Maxwell ne prend pas en compte les effets de la couche de Knudsen. C'est pourquoi nous avons calculé aussi le coefficient d'accommodation α_L à partir de l'équation (2.6) établie par Loyalka qui reste basé sur le «scattering kernel» de Maxwell mais qui tient compte des effets de la couche de Knudsen. Ces nouvelles valeurs α_L calculées expérimentalement à l'aide du coefficient de glissement σ_p^{2nd} sont données dans le tableau 4.4 et comparées avec des coefficients

d'accommodations provenant de la littérature. Quelques soient les gaz considérés, on peut donc remarquer que nos surfaces ne se comportent pas comme des matériaux totalement diffus. On constate aussi que plus le gaz est lourd et plus l'effet spéculaire est important dans la réflexion. Ce comportement se retrouve aussi bien avec la formule simplifiée de Maxwell qu'avec celle plus sophistiquée de Loyalka.

Effet du second ordre en régime de glissement

Dans une démarche semblable à celle du paragraphe précédent, le coefficient du second ordre σ_{2p} défini dans le chapitre 2 s'obtient en identifiant les équations (2.17) et (4.1).

$$A_2 = \frac{\sigma_{2p}}{k_\lambda^2} = \frac{B_2^{exp}(\mathcal{P} - 1)}{16 \ln \mathcal{P}(\mathcal{P} + 1)}. \quad (4.4)$$

La comparaison directe du coefficient expérimental du second ordre σ_{2p}^{2nd} avec les valeurs théoriques de Cercignani (1964) ou Deissler (1964) présentées dans le tableau 2.2 n'est pas très significative car ces deux auteurs ont conduit leur travail dans une géométrie rectangulaire. Les résultats de Cercignani (1964) pour le second ordre ont été obtenus par la résolution de l'équation modèle cinétique BGK en considérant un cas simple d'écoulement de Poiseuille où le gradient de vitesse dans le sens de l'écoulement est négligeable. Ce n'est donc pas de notre configuration expérimentale. L'autre approche théorique, celle de Deissler (1964) est basée sur un concept d'un libre parcours moyen effectif pour décrire le transfert de moment sans utiliser l'équation de Boltzmann. Deissler a obtenu ainsi une valeur du coefficient de glissement du second ordre égale à $9\pi/32 \sim 0.883$ proche de celle de Cercignani (1964) (voir tableau 2.2)

Des résultats expérimentaux sur la détermination du coefficient de second ordre ont été obtenus par Maurer *et al.* (2003) dans un microcanal. En plus des différences géométriques le travail de Maurer *et al.* (2003) présente par rapport au nôtre quelques différences de méthodes : les mesures sont prolongées jusqu'à $Kn_m = 0.8$ et, à ce degré de raréfaction, les mesures intègrent probablement des effets du régime transitionnel. De plus leurs conditions expérimentales mêlent une large gamme de rapports de pressions \mathcal{P} alors que les nôtres sont centrées autour de valeurs fixes et distinctes de ces rapports ($\mathcal{P} = 3, 4, 5$). D'autre part le calcul des effets du second ordre apparaît aussi très sensible aux erreurs expérimentales (Maurer *et al.* (2003)). Néanmoins on note que nos résultats présentés dans le tableau 4.3 sont du même ordre de grandeur que ceux de Maurer *et al.* (2003) et que l'influence du rapport de pression \mathcal{P} sur σ_{2p} reste pratiquement inférieure ou égale aux erreurs expérimentales.

L'investigation que nous avons menée dans ce tube sur la gamme de Knudsen $[0, 0.3]$ nous a conduits à justifier l'utilisation de conditions limites du second ordre dans les équations NS (Ewart *et al.* (2007b)). Les valeurs des coefficients du second ordre ont été obtenues avec une précision qui s'est améliorée au fil du temps. Nous avons donc poursuivi l'investigation du coefficient σ_{2p} du second ordre sur lequel il n'existe que peu de travaux (Cercignani (1990), Sone (2006)), pour préciser la dépendance de ce

4. RÉSULTATS DANS LES MICROTUBES

	Azote	Argon	Hélium
Porodnov & Tuchvetov (1979) [†]	0.925 ± 0.014	0.927 ± 0.028	0.895 ± 0.004
Arkilic <i>et al.</i> (1997) [†]	$0.81 - 0.96$	$0.7 - 1$	-
Maurer <i>et al.</i> (2003) [‡]	0.87 ± 0.03	-	0.91 ± 0.03
Colin <i>et al.</i> (2004) [‡]	0.93	-	0.93
α_M (Tableau 4.3) [‡]	0.908 ± 0.041	0.871 ± 0.017	0.914 ± 0.009
α_L (Tableau 4.3) [‡]	0.981 ± 0.041	0.942 ± 0.017	0.986 ± 0.009

TABLE 4.4 – Coefficients d’accommodations obtenus de nos expériences et de la littérature selon différents modèle : [†] est une approximation polynomiale du premier ordre, [‡] est une approximation polynomiale du second ordre. Tous les calculs des coefficients proviennent de l’équation (2.5) tandis que les résultats de la dernière ligne résultent de l’équation (2.6).

coefficient à l’égard de la masse moléculaire, ainsi que sa sensibilité à l’égard de la courbure (influence du diamètre). On a donc prolongé cette étude sur d’autres tubes de diamètres différents ($D = 50$ et $75 \mu m$) avec différents gaz. Les résultats obtenus dans la suite sont soumis à la même évaluation statistique que les résultats présentés précédemment. Ils concernent la même plage de Knudsen. Enfin l’analyse portera aussi sur un gaz supplémentaire (Xénon) pour confirmer l’influence de la masse moléculaire. En effet, dans ce premier tube on peut constater sur le tableau 4.2 que B_2^{exp}/A_2^{exp} (*i.e.* l’influence relative des effets de second ordre) augmente avec la masse moléculaire.

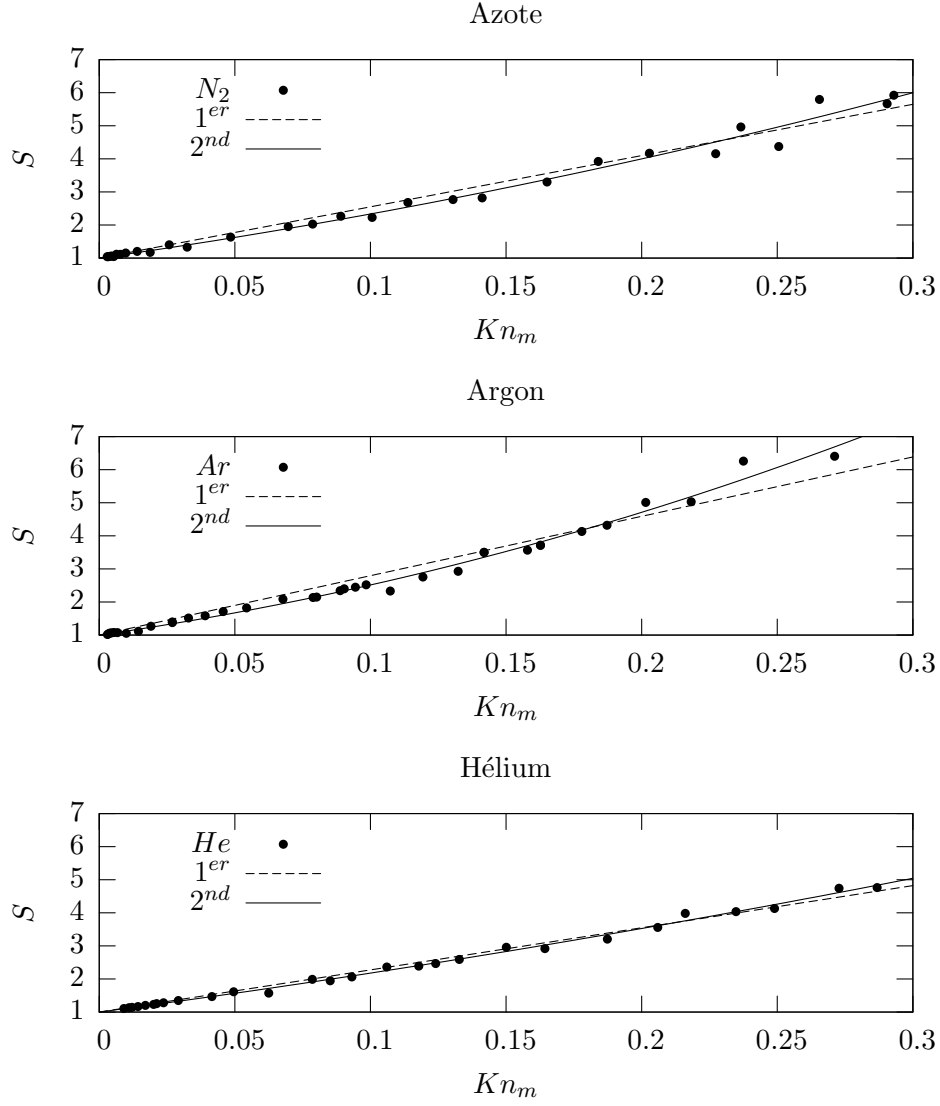


FIGURE 4.2 – Débits massiques adimensionnés pour les trois gaz avec $\mathcal{P} = 5$ et $D = 25 \mu m$. Les points expérimentaux sont reliés par une approximation polynomiale du premier, puis du second ordre. Les coefficients A_i^{exp} et B_i^{exp} obtenus sont présentés dans le tableau 4.2 page 70. Les résultats et les tracés concernant les autres rapports de pressions $\mathcal{P} = 4$ et $\mathcal{P} = 3$ sont semblables.

4. RÉSULTATS DANS LES MICROTUBES

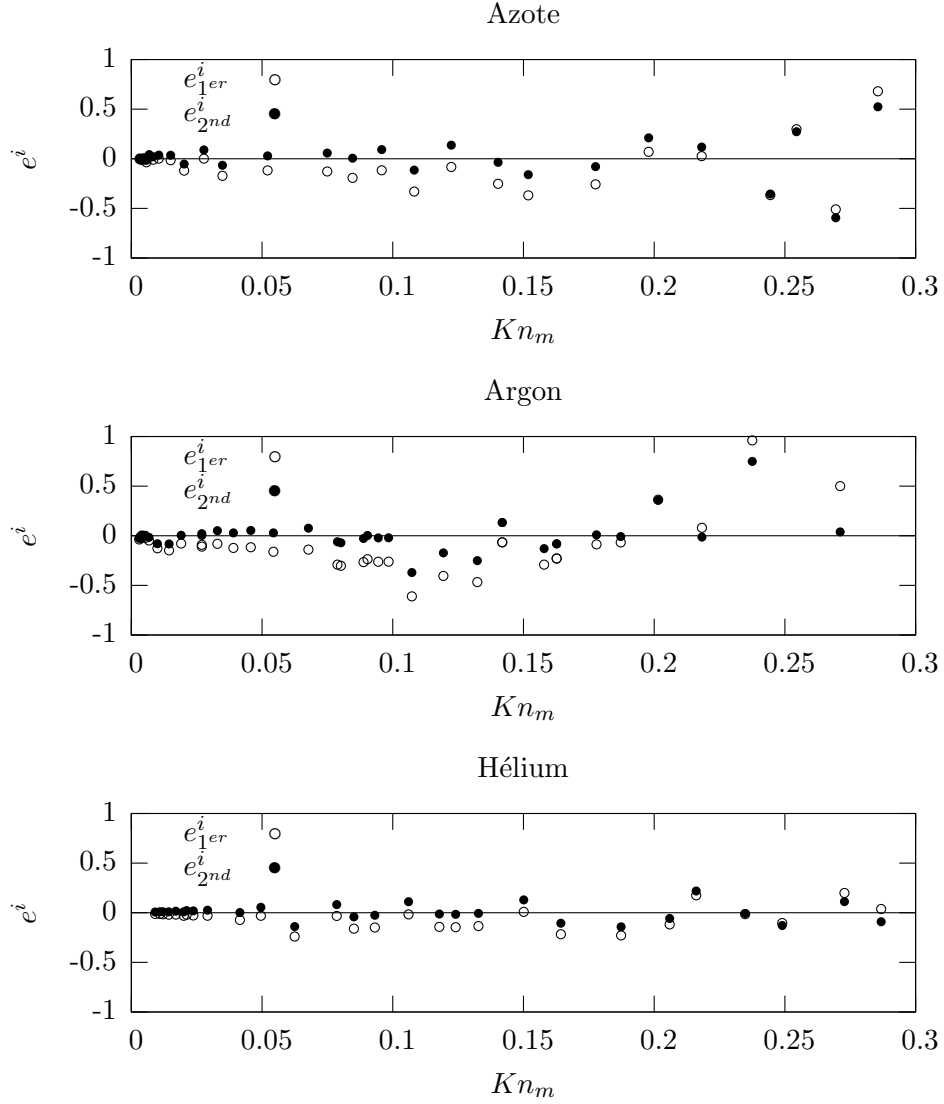


FIGURE 4.3 – Résidu du premier et du second ordre pour les trois gaz pour $\mathcal{P} = 5$ et $D = 25 \mu m$. Dans les trois cas, pour le premier ordre, les résidus sont négatifs jusqu'à environ 0.2 puis ils deviennent positifs. Pour le second ordre, ils sont équirépartis, ce qui corrobore le pertinence de cette approche sur cette intervalle. Il faut noter que plus le gaz est «léger», plus la différence entre les deux ordres est faible. Les résidus des autres rapports de pressions $\mathcal{P} = 4$ et $\mathcal{P} = 3$ donnent des résultats identiques.

4.1.2 Tube de 50 μm

L'étude menée dans le tube de 25 μm n'a pas montré d'influence significative des rapports de pression sur nos résultats. C'est pourquoi dans ce nouveau microtube, le rapport des pressions sera fixé et égal à 5 pour toutes les expériences. Les dimensions du tube de 50 μm sont données dans le tableau 1.2 page 18 tandis que les nouvelles conditions expérimentales sont présentées dans le tableau 4.5. Pour ces expériences nous avons modifié légèrement notre dispositif expérimental. La méthode de la goutte a été définitivement abandonnée et le volume des réservoirs a été réduit pour permettre des expériences plus courtes. Une conséquence directe de ces modifications est l'amélioration de la stabilité thermique du système et la possibilité d'étudier des régimes plus raréfiés (régime transitionnel et moléculaire libre). Cette nouvelle étude dans le tube de 50 μm

	Azote		Xénon		Argon		Hélium	
	<i>Min</i>	<i>Max</i>	<i>Min</i>	<i>Max</i>	<i>Min</i>	<i>Max</i>	<i>Min</i>	<i>Max</i>
P_{in} [Pa]	660.82	35613.	361.50	30665.	607.82	63315.	2006.1	62995.
P_{out} [Pa]	131.422	7126.4	71.851	6284.1	120.919	12808.	401.5	12966.
Kn_m	0.0051	0.2764	0.0031	0.2683	0.0029	0.3038	0.0092	0.2903
\mathcal{P}_E	4.94	5.07	4.88	5.09	4.84	5.10	4.86	5.07
\mathcal{P}_C	5.01		4.99		4.97		4.97	

TABLE 4.5 – Conditions expérimentales pour le tube de 50 μm sur la gamme de Knudsen [0-0.3]. \mathcal{P}_E est le rapport de pression expérimental P_{in}/P_{out} . \mathcal{P}_C est la moyenne du rapport \mathcal{P}_E .

est centrée sur deux points :

1. Pour ce qui concerne le régime de glissement, nous continuons l'étude de la modélisation du second ordre sur l'intervalle de Knudsen [0-0.3] ainsi que l'évaluation des coefficients de glissement et d'accommodations. Pour le coefficient de glissement du second ordre nous amorçons ainsi un étude en fonction de la courbure.
2. Par ailleurs on verra que dans ce tube nous avons étendu le domaine de mesure des débits jusqu'au régime moléculaire libre (*cf.* paragraphe 4.2, page 87).

Effet du premier ordre en régime de glissement

Sur ce nouveau tube l'analyse des coefficients statistiques ainsi que l'analyse des résidus confirment les résultats des paragraphes précédents : une modélisation du second ordre est plus pertinente qu'une modélisation du premier ordre sur le domaine de Knudsen [0 – 0.3]. Mais la différence entre les deux modélisations est moins significative que dans le tube de 25 μm , particulièrement dans l'analyse des résidus où il est quasiment impossible de distinguer des différences entre le premier et le second ordre.

L'analyse des coefficients s'effectue comme précédemment. Ils sont obtenus en combinant les coefficients A_i^{exp} et B_i^{exp} expérimentaux provenant du traitement des résultats

4. RÉSULTATS DANS LES MICROTUBES

\mathcal{P}_{Th}	Kn_m	A_1^{exp}	A_2^{exp}	B_2^{exp}	s_r	r^2
Azote						
5	[0 – 0.3]	13.45 ± 0.10	-	-	0.0569	0.9974
5	[0 – 0.3]	-	12.11 ± 0.14	6.627 ± 0.679	0.0256	0.9995
Xénon						
5	[0 – 0.3]	15.43 ± 0.15	-	-	0.0977	0.9945
5	[0 – 0.3]	-	13.66 ± 0.43	8.698 ± 2.023	0.0777	0.9967
Argon						
5	[0 – 0.3]	14.97 ± 0.12	-	-	0.0843	0.9966
5	[0 – 0.3]	-	13.13 ± 0.24	8.124 ± 1.029	0.0472	0.9990
Hélium						
5	[0 – 0.3]	10.99 ± 0.11	-	-	0.0769	0.9945
5	[0 – 0.3]	-	10.32 ± 0.39	3.173 ± 1.752	0.0532	0.9952

TABLE 4.6 – A_i^{exp} , B_i^{exp} , s_r et r^2 obtenus par une approximation polynomiale du premier degré ($i = 1$) ou du second degré ($i=2$) pour $D = 50 \mu m$.

à l'aide des approximations exprimées sur les équations (4.1). Si nous regardons les coefficients d'accommodations obtenus à l'aide d'une modélisation du second ordre α_M^{2nd} (tableau 4.2 page 70 et tableau 4.6 page 78) les résultats montrent une fois encore que le matériaux n'est pas totalement diffus et que les molécules les plus légères (Hélium) sont les plus diffuses dans la réflexion à la paroi. Cependant on s'aperçoit que l'effet spéculaire n'augmente pas proportionnellement à la masse moléculaire puisque lorsqu'on passe de l'argon ($m = 39.948 \text{ g mol}^{-1}$) au xénon ($m = 131.29 \text{ g mol}^{-1}$) le coefficient d'accommodation ne décroît pas de manière très importante. On remarque aussi que les coefficients dérivés de la formule de Loyalka évoluent dans le même sens que ceux dérivés de la formule de Maxwell (tableau 4.8).

\mathcal{P}_{Th}	σ_p^{1er}	α_M^{1er}	σ_p^{2nd}	α_M^{2nd}	σ_{2p}
Azote					
5	1.229 ± 0.009	0.838 ± 0.004	1.107 ± 0.012	0.889 ± 0.005	0.092 ± 0.009
Xénon					
5	1.268 ± 0.013	0.822 ± 0.005	1.123 ± 0.035	0.882 ± 0.015	0.097 ± 0.023
Argon					
5	1.279 ± 0.011	0.819 ± 0.005	1.122 ± 0.020	0.883 ± 0.010	0.098 ± 0.013
Hélium					
5	1.081 ± 0.010	0.901 ± 0.005	1.014 ± 0.038	0.933 ± 0.019	0.048 ± 0.026

TABLE 4.7 – Les coefficients expérimentaux σ_p^i et σ_{2p} sont obtenus à partir des coefficients du tableau 4.6, α_M est le coefficient de glissement utilisant le formalisme de Maxwell (équation (2.5)).

4.1 Régime de glissement en microtubes

α	Azote	Xénon	Argon	Hélium
$\alpha_M(D = 25 \mu m)$	0.908 ± 0.041	-	0.871 ± 0.017	0.914 ± 0.009
$\alpha_M(D = 50 \mu m)$	0.889 ± 0.005	0.882 ± 0.015	0.883 ± 0.010	0.933 ± 0.019
$\alpha_L(D = 25 \mu m)$	0.981 ± 0.041	-	0.942 ± 0.017	0.986 ± 0.009
$\alpha_L(D = 50 \mu m)$	0.961 ± 0.005	0.954 ± 0.015	0.954 ± 0.010	1.008 ± 0.019

TABLE 4.8 – Coefficients d’accommodations obtenus de nos expériences dans deux tubes différents mais avec $\mathcal{P} = 5$. Tous les calculs des coefficients proviennent de l’équation (2.6) avec une modélisation du second ordre.

Effet du second ordre en régime de glissement

L’augmentation des effets de second ordre en fonction de la masse moléculaire du gaz *i.e.* constatée précédemment est confirmée sur ce deuxième tube. Toutefois l’importance quantitative des coefficients du second ordre (coefficients expérimentaux et de glissement) sont très différents de ceux obtenus dans le tube de $25 \mu m$. La comparaison des coefficients B_2^{exp} de la table 4.2 page 70 avec ceux du tableau 4.7 page 78 montrent qu’il existe un facteur approximativement égal à trois entre les coefficients B_2^{exp} respectifs des trois gaz (He , Ar et N_2) dans ces deux tubes.

L’évolution du coefficient B_2^{exp} d’un tube à l’autre semble montrer un accroissement des effets du second ordre quand le diamètre du tube diminue *i.e.* quand la courbure augmente. Pour avoir confirmation de cette évolution, nous allons procéder à une série de mesures dans un tube de $75 \mu m$, en régime de glissement.

4. RÉSULTATS DANS LES MICROTUBES

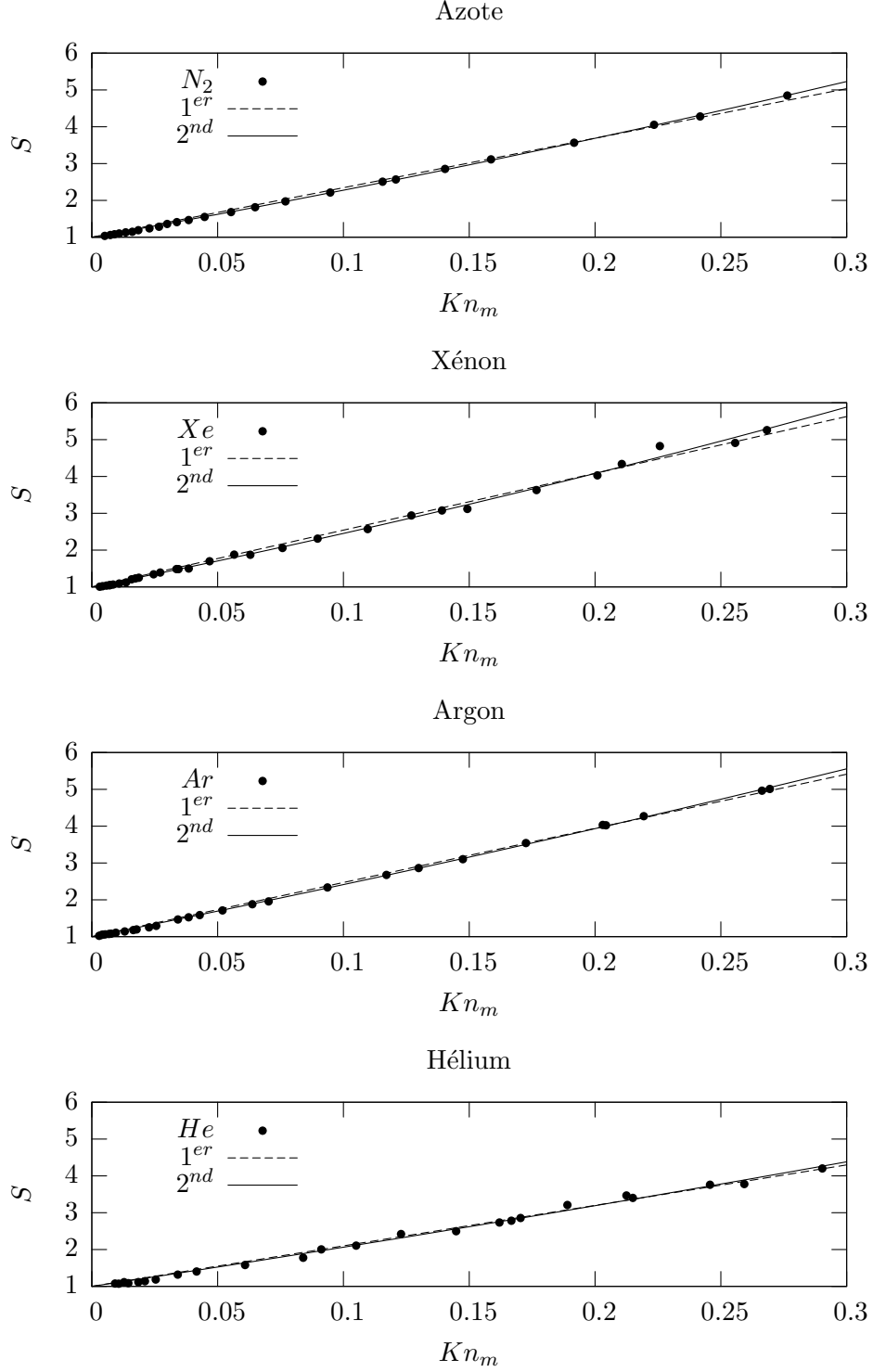


FIGURE 4.4 – Débits massiques adimensionnés pour les quatre gaz avec $\mathcal{P} = 5$ et $D = 50 \mu m$. Les points expérimentaux sont reliés par une approximation polynômiale du premier puis du second ordre. Les coefficients A_i^{exp} et B_i^{exp} obtenus sont présentés dans la table 4.6 page 78.

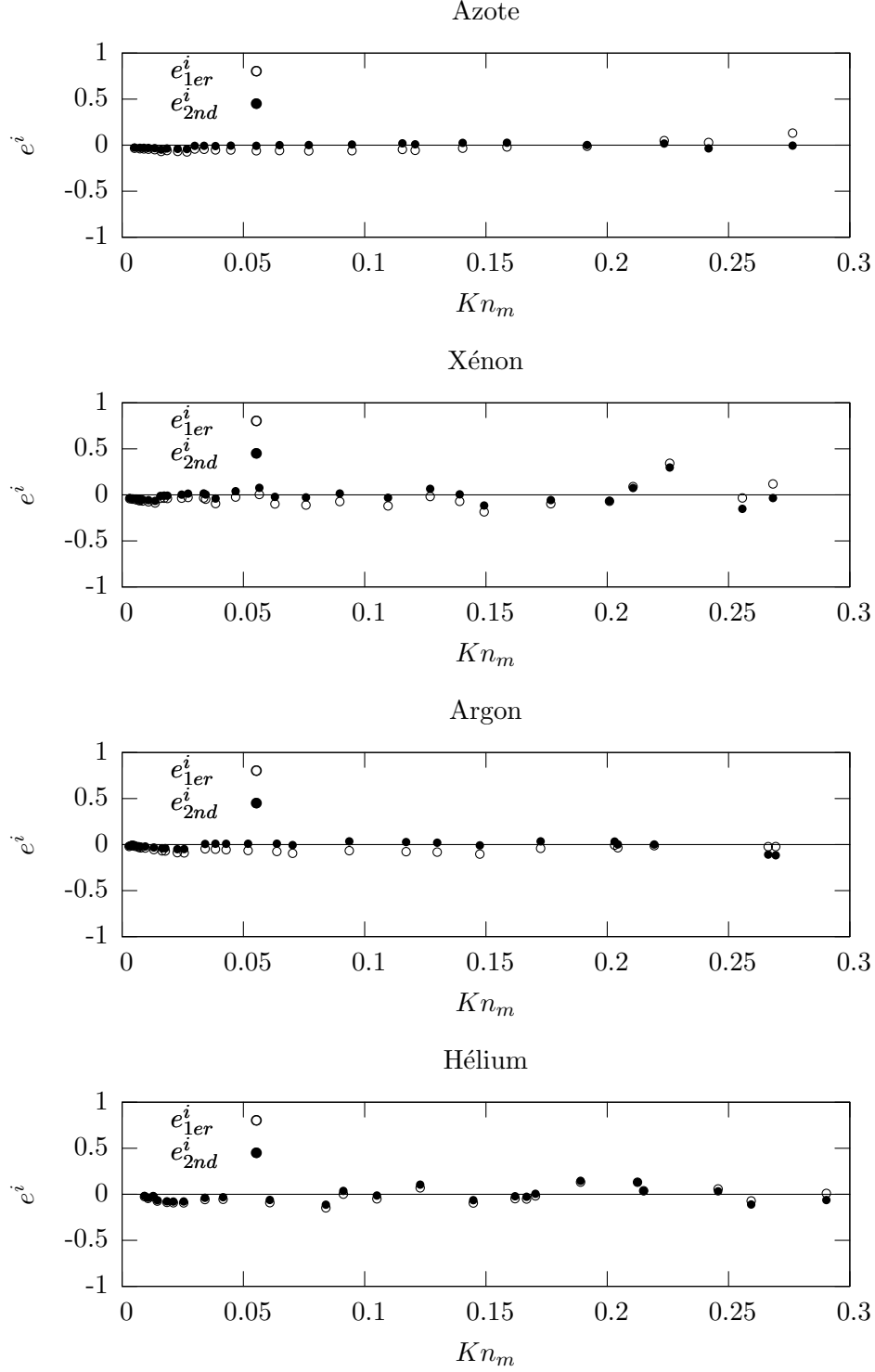


FIGURE 4.5 – Résidu du premier et du second ordre pour les quatre gaz avec $\mathcal{P} = 5$ et $D = 50 \mu m$. Dans les quatre cas, les différences entre les différents ordre sont plus ténues que dans le tube de $25 \mu m$, spécialement pour l’Hélium où il est difficile de distinguer la pertinence des modélisations du premier et du second ordre.

4. RÉSULTATS DANS LES MICROTUBES

4.1.3 Tube de 75 μm

L'utilisation de ce dernier tube confirme qualitativement l'influence de la courbure (décrite précédemment) sur les effets du second ordre dans l'intervalle de Knudsen $[0 - 0.3]$. Cette nouvelle étude n'a pas pu être réalisée avec l'hélium car les temps d'expériences n'excédaient pas quelques secondes. Ce qui rendait les mesures pratiquement impossibles. Les conditions expérimentales de ces nouvelles études sont présentées dans la table 4.9.

	Azote		Argon	
	<i>Min</i>	<i>Max</i>	<i>Min</i>	<i>Max</i>
P_{in} [Pa]	660.82	35613.	607.82	63315.
P_{out} [Pa]	131.422	7126.4	120.919	12807.5
Kn_m	0.0051	0.2774	0.0159	0.291
\mathcal{P}_E	4.93	5.08	4.87	5.10
\mathcal{P}_C	5.01		4.99	

TABLE 4.9 – Conditions expérimentales pour le tube de 75 μm sur la gamme de Knudsen $[0-0.3]$. \mathcal{P}_E est le rapport de pression expérimental P_{in}/P_{out} . \mathcal{P}_C est la moyenne du rapport \mathcal{P}_E .

Effet du premier ordre en régime de glissement

Les coefficients expérimentaux A^{exp} et B^{exp} obtenus avec les approximations polynomiales du premier et du second ordre (figure 4.6) sont reportés dans le tableau 4.10. Dans ce nouveau tube la distinction entre la modélisation du premier et du second ordre est difficile à l'aide de la seule analyse des coefficients statistiques s_r et r^2 . L'analyse des résidus qui est présentée sur la figure 4.6 n'apporte pas non plus de réponse claire sur le choix de la modélisation la plus pertinente. Les coefficients A_1^{exp} et A_2^{exp} du tableau 4.10 se rapprochent, il en va de même pour les coefficients d'accommodations (α_M^{1er} et α_M^{2nd}). L'évolution de ces coefficients en fonction du gaz confirme celle trouvée pour les autres diamètres.

\mathcal{P}_{Th}	Kn_m	A_1^{exp}	A_2^{exp}	B_2^{exp}	s_r	r^2
Azote						
5	$[0 - 0.3]$	13.39 ± 0.04	-	-	0.0239	0.9996
5	$[0 - 0.3]$	-	13.06 ± 0.10	1.52 ± 0.44	0.0189	0.9998
Argon						
5	$[0 - 0.3]$	14.75 ± 0.036	-	-	0.0139	0.9997
5	$[0 - 0.3]$	-	14.72 ± 0.12	0.11 ± 0.57	0.0218	0.9997

TABLE 4.10 – A_i^{exp} , B_i^{exp} , s_r et r^2 obtenus par une approximation polynomiale du premier degré ($i = 1$) ou du second degré ($i=2$) pour $D = 75 \mu m$.

Effet du second ordre en régime de glissement

Comme cela a été évoqué dans le tableau 4.8 indique clairement que les effets du second ordre sont très faibles voir non pertinents. La décroissance du poids de ces effets lorsque la courbure décroît est donc largement confirmée.

En analysant les critères statistiques habituels on voit que seul le B_2^{exp} de l'azote peut être retenu comme pertinent. Il peut paraître surprenant que l'effet de second de l'argon qui est plus lourd que l'azote apparaisse ici comme non significatif (en contradiction avec la hiérarchie établie en fonction de la masse moléculaire dans les deux tubes précédents); mais cette apparente contradiction est sans doute explicable par l'importance de l'erreur statistique qui affecte ici le coefficient de second ordre de l'argon.

\mathcal{P}_{Th}	σ_p^{1er}	α_M^{1er}	σ_p^{2nd}	α_M^{2nd}	σ_{2p}^{2nd}
Azote					
5	1.224 ± 0.003	0.839 ± 0.001	1.193 ± 0.007	0.852 ± 0.003	0.021 ± 0.006
Argon					
5	1.260 ± 0.003	0.826 ± 0.002	1.258 ± 0.010	0.827 ± 0.005	0.001 ± 0.007

TABLE 4.11 – Les coefficients expérimentaux σ_p^i et σ_{2p}^i sont obtenus à partir des coefficients de la table 4.10, α_M est le coefficient d'accommodation obtenu à partir de la formule de Maxwell (équation (2.5)).

4. RÉSULTATS DANS LES MICROTUBES

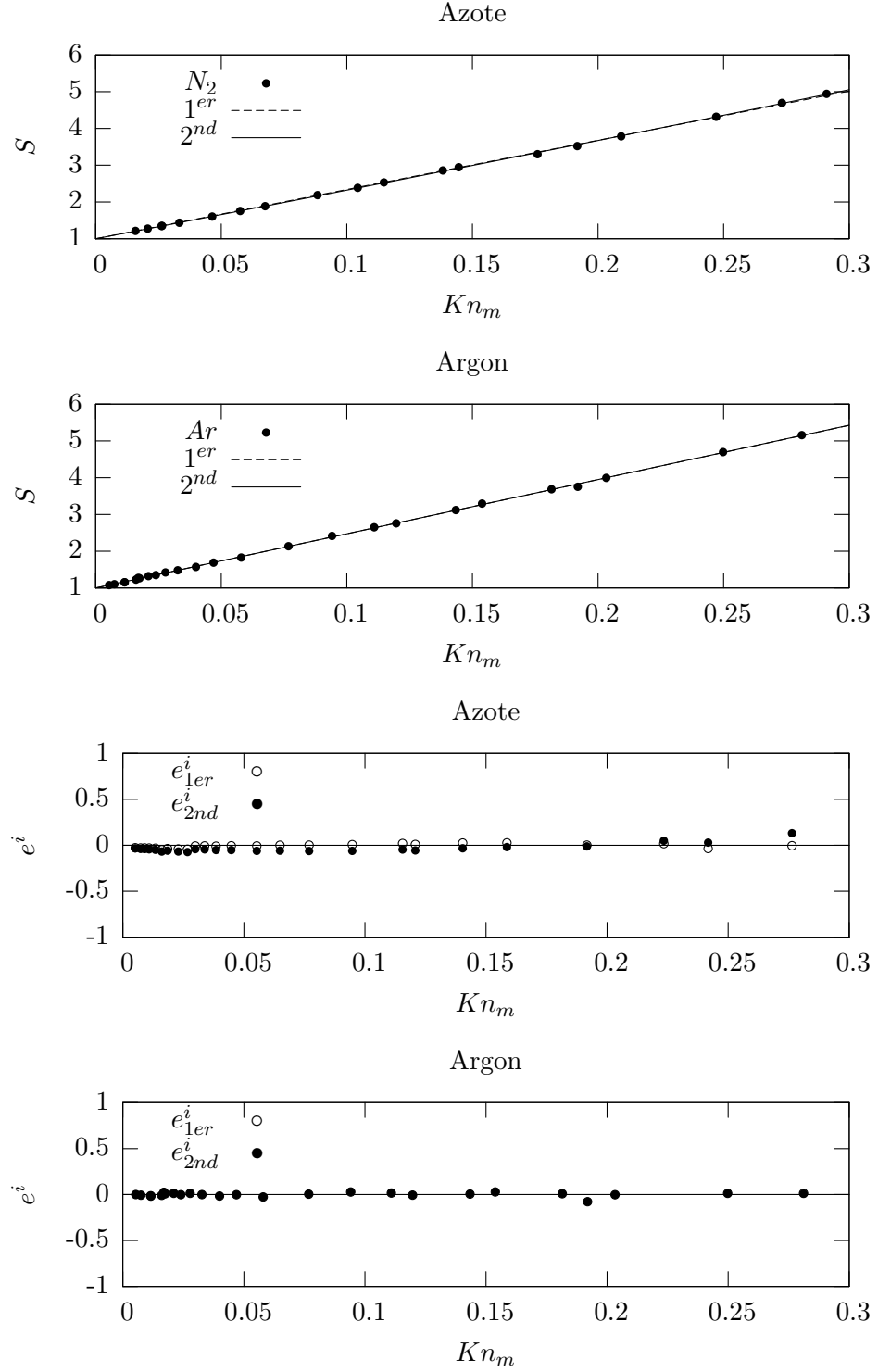


FIGURE 4.6 – Débits massiques adimensionnés pour azote et argon avec $\mathcal{P} = 5$ et $D = 75 \mu m$ avec leur approximation polynomiale (les deux premières figures), et résidus du premier et du second ordre (les deux dernières figures). Aucune distinction des deux modélisations n'est possible sur l'analyse des résidus.

Conclusions générales sur le régime de glissement

Les tableaux (4.12) et (4.13) montrent clairement que l'importance des effets de second ordre augmentent avec la courbure (*i.e.* ils décroissent avec le diamètre); et cette augmentation se retrouve dans des proportions assez semblables pour tous les gaz analysés. Par ailleurs on constate aussi que dans chaque tube, lorsqu'un effet du second ordre est clairement établi, cette effet augmente avec la masse moléculaire. On peut noter que les résultats obtenus dans le tube de $75\,\mu m$ de diamètre où seul l'azote pourrait être crédité d'un effet du second ordre, ne contredit pas vraiment cette classification. En effet, pour des raisons contingentes l'erreur sur le coefficient du second ordre de l'argon est telle que la mesure de ce coefficient devient pratiquement impossible.

Pour les effets du premier ordre on constate aussi que dans chaque tube l'effet spéculaire augmente avec la masse moléculaire du gaz *i.e.* que le coefficient d'accommodation diminue. Toutefois sa variation s'atténue lorsque la masse moléculaire devient très forte (*cf.* xénon).

De plus on peut constater aussi que les variations importantes sur les coefficients du second ordre avec la courbure s'accompagnent de variations corollaires de faible amplitude sur les coefficients de glissement du premier ordre (σ_p^{2nd}). Cette influence réciproque n'est pas surprenante *a priori*, puisque des relations théoriques ont déjà été proposées entre les coefficients du premier et second ordre Cercignani (1990). Mais dans le cadre de la loi de réflexion cinétique de Maxwell le coefficient σ_p^{2nd} s'exprime à l'aide du seul coefficient d'accommodation tangentiel dont la théorie ne prévoit pas de variations avec la géométrie. On voit sur le tableau 4.13 que lors du passage du tube de diamètre $50\,\mu m$ à $75\,\mu m$ pour un même gaz la variation de ce coefficient d'accommodation dépasse la tolérance permise par les barres d'erreurs. Et la situation est la même si le coefficient d'accommodation est exprimé par α_L (tableau 4.13).

Bien que ce premier résultat demande quelques confirmations, il peut signifier une insuffisante précision du «scattering kernel» de Maxwell pour modéliser la réflexion sur des géométries non planes. Le recours à des opérateurs de réflexion, incluant plusieurs coefficients d'accommodation (modèle CL où modèle plus récent faisant intervenir des coefficients d'accommodation directionnels) pourrait permettre de résoudre cette apparente contradiction.

Enfin au sujet des coefficients intervenant au premier ordre il faut signaler encore que le coefficient d'accommodation diminue aussi légèrement avec la masse moléculaire; en d'autres termes le caractère «spéculaire» de la réflexion augmente avec la masse de la molécule. Certes cette variation (de α avec la masse) est souvent à la limite de l'incertitude due aux erreurs expérimentales; mais cette tolérance est parfois dépassée (dans les tubes de diamètre $50\,\mu m$ et $75\,\mu m$) et surtout cette variation se produit systématiquement dans le même sens en fonction de la variation de la masse moléculaire. Il y a donc tout lieu de penser qu'il s'agit bien d'un effet physique.

4. RÉSULTATS DANS LES MICROTUBES

D	A_1^{exp}	A_2^{exp}	B_2^{exp}	B_2^{exp}/A_2^{exp}
Azote ($m = 28 \text{ g mol}^{-1}$)				
$25 \mu m$	15.49 ± 0.313	11.67 ± 0.97	16.63 ± 4.06	1.43 ± 0.47
$50 \mu m$	13.45 ± 0.10	12.11 ± 0.14	6.63 ± 0.68	0.55 ± 0.06
$75 \mu m$	13.39 ± 0.04	13.06 ± 0.10	1.52 ± 0.44	0.12 ± 0.04
Argon ($m = 39.95 \text{ g mol}^{-1}$)				
$25 \mu m$	18.18 ± 0.39	13.22 ± 0.80	24.27 ± 3.70	1.84 ± 0.39
$50 \mu m$	14.97 ± 0.12	13.13 ± 0.24	8.12 ± 1.03	0.62 ± 0.09
$75 \mu m$	14.75 ± 0.04	14.72 ± 0.12	0.11 ± 0.57	0.01 ± 0.05
Hélium ($m = 4 \text{ g mol}^{-1}$)				
$25 \mu m$	12.99 ± 0.15	10.81 ± 0.37	9.16 ± 1.50	0.85 ± 0.17
$50 \mu m$	10.99 ± 0.11	10.32 ± 0.39	3.17 ± 1.75	0.55 ± 0.32

TABLE 4.12 – Comparaison des différents coefficients expérimentaux A_i^{exp} et B_i^{exp} suivant les gaz dans des microtubes de différents diamètres pour $\mathcal{P}_{Th} = 5$.

D	σ_p^{2nd}	α_L^{2nd}	α_M^{2nd}	σ_{2p}^{2nd}
Azote				
$25 \mu m$	1.066 ± 0.088	0.981 ± 0.041	0.908 ± 0.040	0.231 ± 0.057
$50 \mu m$	1.107 ± 0.012	0.961 ± 0.005	0.889 ± 0.005	0.092 ± 0.009
$75 \mu m$	1.193 ± 0.007	0.921 ± 0.004	0.852 ± 0.003	0.021 ± 0.006
Argon				
$25 \mu m$	1.130 ± 0.068	0.942 ± 0.017	0.879 ± 0.029	0.294 ± 0.045
$50 \mu m$	1.122 ± 0.020	0.954 ± 0.010	0.883 ± 0.010	0.098 ± 0.013
$75 \mu m$	1.258 ± 0.010	0.893 ± 0.004	0.827 ± 0.005	0.001 ± 0.007
Hélium				
$25 \mu m$	1.062 ± 0.036	0.986 ± 0.009	0.910 ± 0.017	0.147 ± 0.024
$50 \mu m$	1.014 ± 0.038	1.008 ± 0.019	0.933 ± 0.019	0.048 ± 0.026

TABLE 4.13 – Comparaison des différents coefficients expérimentaux de glissements et d'accommodations suivant les gaz dans des microtubes de différents diamètres pour $\mathcal{P}_{Th} = 5$.

4.2 Régime transitionnel et moléculaire libre en microtubes ($D = 50 \mu m$)

Pour les expériences de cette section le banc de mesure a été poussé jusqu'à ses limites avec les quatre gaz (hélium, argon, xénon et azote) dans le tube de $50 \mu m$. Les débits sont adimensionnés suivant l'équation (2.21) :

$$G_{tu} = \frac{L\sqrt{2\mathcal{R}T}}{\pi R^3(P_{in} - P_{out})} \dot{M}. \quad (4.5)$$

La signification des paramètres a été donnée au chapitre 2 ainsi que les hypothèses associées à ce type de calcul. Les résultats sont présentés sur la figure 4.8 pour un rapport de pression $\mathcal{P} = 5$. Ils sont portés en fonction du paramètre de raréfaction δ_m (2.20) qui est calculé avec le modèle d'interaction HS. Pour chaque série de mesures relative à chacun des gaz les valeurs limites (les plus basses) du paramètre de raréfaction sont atteintes en utilisant une pression P_{out} aussi basse que possible et du même ordre pour tous les gaz (quelques dizaines de Pa) mais du fait des différentes valeurs prises par la constante spécifique \mathcal{R} , on obtient finalement des valeurs assez différentes pour les bornes inférieures des gammes de δ_m explorées : un facteur 15 existe entre la borne inférieure relative à l'étude du Xe et celle relative à l'étude de He .

Pour comparer nos résultats avec un modèle, nous utilisons une solution numérique du modèle cinétique BGK obtenue par Porodnov & Turchetov (1979) pour différentes accommodations à la paroi. Nous avons utilisé des tables de ces auteurs et nous leur avons appliqué la modélisation proposée par Sharipov & Seleznev (1998) et décrite au chapitre 2. On a vu que dans le cadre des hypothèses admises par l'auteur cette modélisation aboutissait à la formule (2.22). En résumé, les résultats donnés par l'expression expérimentale (4.5) sont comparés à la courbe théorique donnée par (2.22) et construite à partir des tables de calcul données par Porodnov & Turchetov (1979).

On peut grossièrement diviser l'analyse des résultats suivant deux domaines de δ_m (ou Kn_m).

1. Au delà d'un certain degré de raréfaction correspondant à peu près à $\delta_m < 1.3$ ou $Kn_m > 0.7$, *i.e.* pour les régimes transitionnels ou moléculaires libres. On constate que les valeurs des coefficients d'accommodation α qui optimisent l'accord entre nos mesures et le modèle cinétique (Porodnov & Turchetov (1979) et Sharipov & Seleznev (1998)) sont $\alpha = 1$ pour He, N_2 et $\alpha = 0.94$ pour Ar, Xe . On voit que bien qu'obtenus avec une modélisation différente et pour des régimes différents, ces résultats semblent compatibles avec ceux que nous avons trouvés en régime de glissement à l'aide de l'approche continue du deuxième ordre. Si l'on se réfère aux α_L^{2nd} correspondants, on voit que les écarts sont généralement inclus dans les barres d'erreurs¹ sauf en ce qui concerne N_2 . On voit aussi que le classement des

1. L'erreur sur le α déduit graphiquement à partir des courbes cinétiques les mieux adaptées aux mesures peut s'obtenir à partir d'une estimation graphique $\Delta\alpha/\Delta G_{tu}$ cette estimation conduit à une erreur très voisine de celle trouvée dans le régime de glissement à l'aide de l'approche continue

4. RÉSULTATS DANS LES MICROTUBES

différentes valeurs de α suivant la masse moléculaire est le même dans les deux approches.

2. En deçà de ce même degré de raréfaction ($\delta_m > 1.3$ ou $Kn_m < 0.7$) *i.e.* en régime de glissement ou en régime transitionnel proche on constate paradoxalement des résultats plus surprenants. Si l'on se réfère encore aux valeurs obtenues pour les coefficients d'accommodation, on constate que les valeurs de α qui optimisent ici l'accord entre les courbes théoriques provenant de l'approche cinétique et nos mesures sont toutes égales à 1. Plus encore en ce qui concerne He on voit que l'accommodation totale «ne suffit pas» pour réduire l'écart (modélisation/expériences) entre la courbe théorique et les points expérimentaux au dessous de la tolérance permise par les barres d'erreurs.

Si l'on regarde plus attentivement les points et les courbes, on voit que globalement les écarts les plus importants sont situés dans la zone transitionnelle proche. Il est difficile d'apporter une explication complète et définitive à ce phénomène ; il semble pourtant que l'on puisse mettre en cause plus particulièrement dans cette zone l'une des hypothèses sur lesquelles est fondée la relation théorique (2.22). En effet l'une de ces hypothèses exprime que la valeur locale du débit adimensionné Σ_{tu} donné en (2.19) ne dépend que du paramètre de raréfaction. Or cette hypothèse est vérifiée lorsque dP/dx est constant : *i.e.* en régime fortement raréfié (régime transitionnel avéré ou moléculaire libre). Elle est également correcte en régime de glissement pur car le dP/dx disparaît alors de l'expression du débit adimensionné Σ_{tu} (2.19). Par contre cette condition n'est pas assurée en régime transitionnel proche, *i.e.* dans la zone incriminée ci-dessus.

En conclusion on notera enfin que le domaine de Knudsen exploré par les courbes données sur les figures 4.7 et 4.8 couvre l'ensemble des régimes d'écoulements pour plusieurs gaz et que ces mesures apportent, par elles mêmes, une quantité d'informations significatives pour l'étude de la microfluidique des gaz.

4.2 Régime transitionnel et moléculaire libre en microtubes ($D = 50 \mu m$)

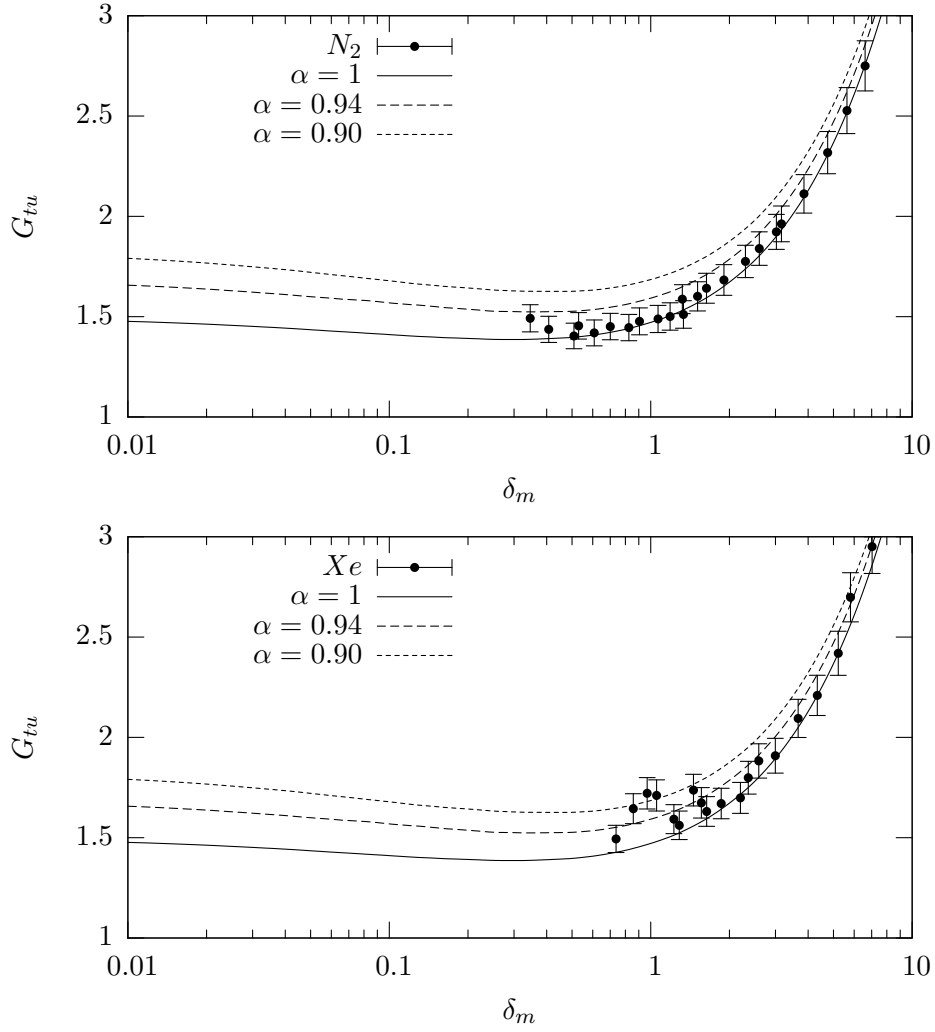


FIGURE 4.7 – Débits massiques addimensionnés selon l'équation (2.21) pour $\mathcal{P} = 5$ dans l'azote et le xénon. Les courbes théoriques proviennent de Porodnov & Tuchvetov (1979) avec $\alpha = 0.90, 0.94, 1$.

4. RÉSULTATS DANS LES MICROTUBES

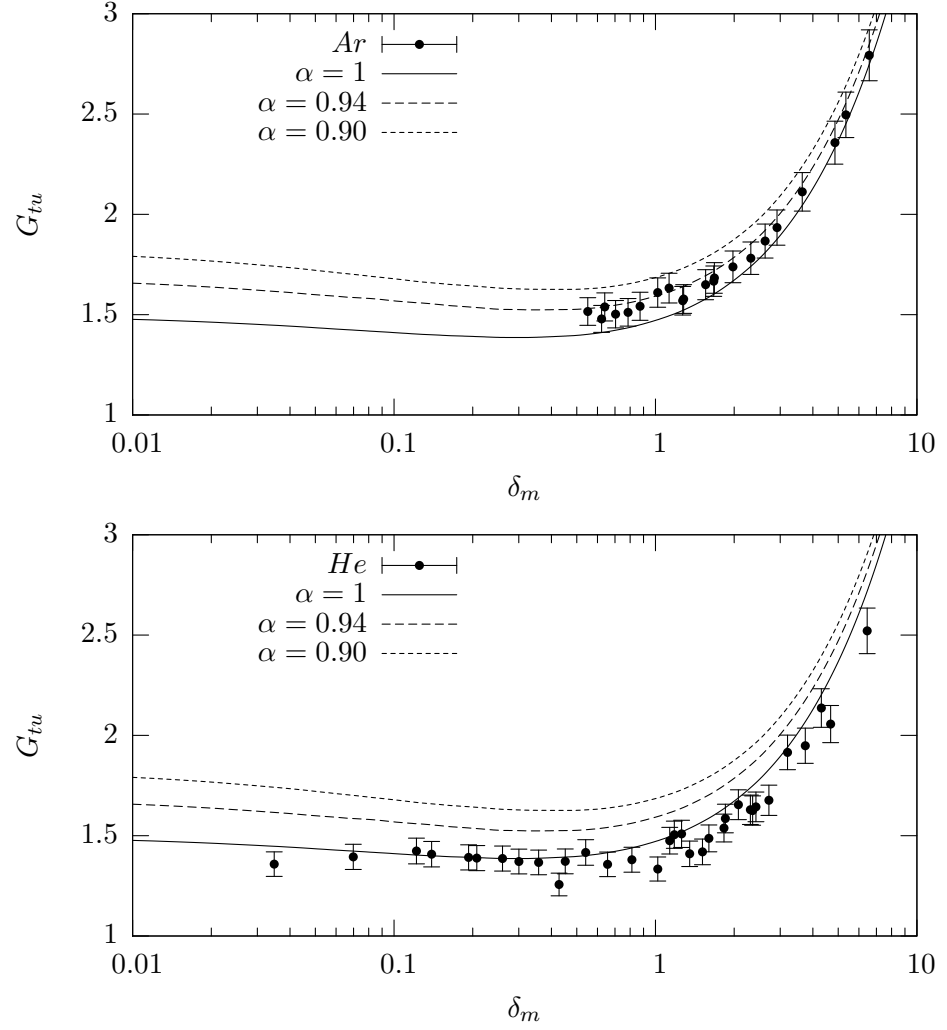


FIGURE 4.8 – Débits massiques addimensionnés selon l'équation (2.21) pour $\mathcal{P} = 5$ dans l'argon et l'hélium. Les courbes théoriques proviennent de [Porodnov & Tuchvetov \(1979\)](#) avec $\alpha = 0.90, 0.94, 1$.

Chapitre 5

Résultats dans les microcanaux

Les résultats obtenus dans ce chapitre concernent l'écoulement de l'hélium dans un microcanal de grande largeur (qui sera modélisé en première approximation comme un écoulement entre deux plaques planes). La source des résultats rapportés ici est double. D'une part nous avons effectué des mesures de débits sur une très large gamme de Knudsen $[0 - 50]$. Pour des raisons que nous détaillons ci-dessous l'analyse de ces résultats expérimentaux est *a priori* scindée en deux grandes parties. On analyse d'une part la zone $Kn_m \in [0 - 0.7]$ et l'on essaie d'en caractériser le régime (glissement et/ou transitionnel proche). Puis on présente le domaine $Kn_m \in [0.7 - 50]$ où s'ordonnent les régimes transitionnel et moléculaire libre.

La deuxième source de nos résultats est constituée par des calculs numériques de type DSMC dont le principe et la validation ont été exposés dans le chapitre 3. On obtient ainsi des indications précieuses, notamment sur les profils de vitesses pour l'instant hors de portée de notre approche expérimentale.

5.1 Résultats pour l'hélium dans le microcanal expérimental en régime de glissement et régime transitionnel $Kn_m < 0.7$

Les expériences effectuées dans le microcanal (décrit dans la table 1.2 page 18), nous ont permis d'explorer l'ensemble des régimes d'écoulements : du régime hydrodynamique continu au proche régime moléculaire libre. Ces expériences ont été menées avec un unique gaz (Hélium) pour trois rapports de pression différents ($\mathcal{P} = 3, 4, 5$). Le résumé des conditions expérimentales est présenté dans le tableau 5.1. L'intervalle de nombres de Knudsen étudié est trop large ($Kn_m \in [0 - 50]$) pour être analysé en totalité avec l'approche continue. Par conséquent, cette intervalle a été divisé en plusieurs domaines d'études.

Le premier domaine $Kn_m \in [0 - 0.7]$ a été analysé suivant trois séquences : $Kn_m \in [0 - 0.3]$, $Kn_m \in [0 - 0.5]$ et $Kn_m \in [0 - 0.7]$. En microcanal on se rend compte que, au moins pour l'hélium, l'approximation linéaire en Kn_m est suffisante (voir seule

5. RÉSULTATS DANS LES MICROCANaux

Hélium						
\mathcal{P}_{Th}	5		4		3	
	<i>Min</i>	<i>Max</i>	<i>Min</i>	<i>Max</i>	<i>Min</i>	<i>Max</i>
P_{in} [Pa]	60.4	109825.	65.1	115474.	121.2	96665.
P_{out} [Pa]	12.2	22633.	15.9	29275.	40.3	32654.1.
Kn_m	0.027	50.2	0.025	45.4	0.028	22.76
\mathcal{P}_E	4.82	5.14	3.90	4.11	2.90	3.06
\mathcal{P}_C	4.98		4.01		2.98	

TABLE 5.1 – Conditions expérimentales dans le microcanal.

pertinente) jusque pour des Kn_m relativement élevés ($Kn_m = 0.5$). De même pour voir l'influence de terme du second degré nous avons dû pousser l'analyse jusqu'à $Kn_m = 0.7$.

Le second domaine est localisé dans $Kn_m \in [0.7-50]$ il inclut un régime transitionnel et le proche régime moléculaire libre. Il sera traité avec l'aide de la théories cinétique dans un prochain paragraphe.

5.1.1 Représentation polynomiale du 1^{er} et 2nd degré

Dans ce domaine de Knudsen, *i.e.* $Kn_m \in [0 - 0.7]$, nous appliquons les méthodes d'approximations polynomiales basées sur les moindres carrés comme on l'a fait dans les microtubes (équation(4.1)). Les coefficients A_i^{exp} et B_i^{exp} , obtenus par cette méthode utilisée pour les débit expérimentaux adimensionnés

$$S_{ca} = \dot{M}_{ca} \left/ \frac{H^3 w \Delta P P_m}{12 \mu \mathcal{R} T L} \right. \quad (5.1)$$

sont présentés dans la table 5.2. Les incertitudes sur les coefficients sont estimées avec l'écart type provenant de la méthode des moindres carrés.

Il est bien connu, et nous l'avons montré pour le cas des microtubes, que les effets du second ordre existent dans le régime de glissement et qu'ils croissent quand le nombre de Knudsen augmente (en deçà de 1). Pour analyser des effets du second ordre dans cette nouvelle géométrie, nous allons comparer d'abord la pertinence des approximations polynomiales (du premier et du second degré) sur les différents intervalles énumérés précédemment en utilisant les différents outils statistiques (s_r et r^2) définis et utilisés dans le chapitre (paragraphe 4.1.1, page 69).

Toutefois les valeurs de Kn_m n'étant plus ici très petites devant 1 nous utilisons dans un premier temps les termes «d'approximations polynomiales du premier ou du second degré» ou encore ceux «d'approximation linéaire» et «d'approximation quadratique» lorsque nous effectuons la comparaison des différentes formes du débit massique. Dans un deuxième temps nous nous demanderons si une telle représentation peut avoir une signification théorique générale dans le cadre de la modélisation du deuxième ordre

5.1 Régime de glissement pour le microcanal expérimental

$\mathcal{P}_{\mathcal{T}}$	A_1^{exp}	s_r	r^2	A_2^{exp}	B_2^{exp}	s_r	r^2
$Kn_m \in [0 - 0.3]$							
5	8.23 ± 0.08	0.064	0.991	7.58 ± 0.20	3.42 ± 0.90	0.054	0.994
4	8.27 ± 0.06	0.044	0.996	7.87 ± 0.18	1.90 ± 0.82	0.030	0.998
3	7.73 ± 0.05	0.015	0.998	7.40 ± 0.12	1.53 ± 0.53	0.025	0.999
5-3	8.15 ± 0.05	0.060	0.992	7.67 ± 0.14	2.29 ± 0.62	0.056	0.993
$Kn_m \in [0 - 0.5]$							
5	8.18 ± 0.06	0.085	0.994	8.23 ± 0.20	-0.14 ± 0.55	0.086	0.994
4	8.28 ± 0.05	0.062	0.997	8.27 ± 0.16	0.04 ± 0.43	0.063	0.997
3	7.89 ± 0.05	0.079	0.994	7.18 ± 0.21	2.21 ± 0.60	0.061	0.996
5-3	8.17 ± 0.04	0.0813	0.995	8.01 ± 0.12	0.47 ± 0.34	0.065	0.995
$Kn_m \in [0 - 0.7]$							
5	8.69 ± 0.088	0.179	0.989	7.35 ± 0.20	2.80 ± 0.39	0.123	0.995
4	8.48 ± 0.053	0.093	0.997	7.95 ± 0.15	1.10 ± 0.29	0.079	0.998
3	8.54 ± 0.139	0.200	0.989	7.18 ± 0.29	2.36 ± 0.48	0.140	0.995
5-3	8.58 ± 0.05	0.163	0.991	7.57 ± 0.13	2.02 ± 0.24	0.126	0.995

TABLE 5.2 – Coefficients A_i^{exp} et B_i^{exp} obtenus avec l’approximation polynomiale du premier ($i = 1$) ou du second ($i = 2$) degré. s_{r_i} est la somme des résidus et r_i est le coefficient de détermination.

du système d’équations continues. En d’autres termes nous verrons si cette forme du second degré peut être interprétée comme provenant du développement à l’ordre deux de solutions de l’équation cinétique. *A priori* ce domaine ($Kn_m \in [0 - 0.7]$) peut relever du régime de glissement et du début du régime de transition. L’analyse qui est faite doit aboutir à clarifier ces questions.

L’analyse des coefficients statistiques présentés dans la table 5.2 montre que les modélisations polynomiales du premier et du second degré ne sont pas vraiment discernables dans les intervalles de Knudsen $[0 - 0.3]$ et $[0 - 0.5]$; dès lors les coefficients des termes du second degré ne sont pas forcément pertinents. Par contre pour un intervalle de Kn_m étendu à $[0 - 0.7]$, le coefficient de détermination r^2 est plus proche de 1 pour la modélisation du second degré. De même le coefficient s_r est alors plus proche de 0 pour la modélisation quadratique. A partir de cette courte analyse, nous pouvons dire qu’une modélisation linéaire est suffisante sur les intervalles $[0 - 0.3]$ et $[0 - 0.5]$. Sur ces intervalles la modélisation quadratique n’est pas requise pour obtenir des résultats satisfaisants et elle comporte des coefficients non significatifs pour le terme du second degré. Notons que sur l’intervalle $[0 - 0.5]$, le coefficient B_2^{exp} est quasi-nul, ce qui conforte notre choix d’une modélisation linéaire. Au delà, sur l’intervalle $[0 - 0.7]$ la modélisation du second degré apparaît comme plus pertinente au vue des coefficients s_r et r^2 ; néanmoins se pose la question de la validité du régime de glissement pour des $Kn_m > 0.5$ et nous reviendrons sur ce point un peu plus loin.

Pour étayer l’accord entre les données expérimentales et les approximations poly-

5. RÉSULTATS DANS LES MICROCANAU

nomiales respectives du premier et second degré, tout comme dans le paragraphe 4.1.1 page 69, nous comparons les erreurs de mesures expérimentales ($\pm 4.5\%$) avec l'erreur statistique des approximations : $\sqrt{\frac{1}{n-p} \sum e_i^2 / S_m^{exp}}$, où S_m^{exp} est la valeur moyenne des valeurs mesurées. On voit ainsi sur les intervalles de Knudsen $[0 - 0.3]$ et $[0 - 0.5]$ que quelque soit le degré de la modélisation cette erreur statistique d'approximation est égale à 3.5%. Par contre sur l'intervalle $[0 - 0.7]$, ce rapport pour la modélisation quadratique est encore égal à 3.5% alors que pour la modélisation linéaire il est supérieur à l'erreur expérimentale. Ces nouveaux critères confirment la pertinence de l'approximation du premier degré pour les intervalles $[0 - 0.3]$ et $[0 - 0.5]$ et celle de l'approximation du second degré pour l'intervalle $[0 - 0.7]$.

Les données expérimentales adimensionnées selon l'équation (2.15) sont présentées sur la figure 5.1. Cette figure montre un léger effet quadratique lorsque l'on représente les débits sur une gamme de Knudsen moyen dépassant 0.5 *e.g.* $Kn_m \in [0 - 0.7]$. Cet aspect graphique confirme l'analyse exposée dans les deux paragraphes précédents.

Finalement, dans nos conditions expérimentales (un écoulement d'hélium isotherme dans un canal parallélépipédique pour $Kn_m \in [0 - 0.7]$), nous distinguerons deux grandes régions :

1. Pour une gamme de Knudsen incluse dans $[0 - 0.5]$: une modélisation du premier degré apparaît suffisante et la modélisation quadratique n'est pas pertinente. Toutefois pour ce référer explicitement au régime de glissement (qui ici serait forcément du premier ordre) on préfère choisir l'intervalle plus restreint $Kn_m \in [0 - 0.3]$. En effet, comme cela a déjà été évoqué, des valeurs maximales $Kn_m = 0.5$ peuvent correspondre localement à des Knudsen proche de 1 notamment en sortie de canal : cela est évidemment incompatible avec un traitement continu complet du problème. Par ailleurs nous verrons dans le paragraphe 5.3.1 que l'écart entre les profils de vitesses obtenus par la méthode DSMC et ceux issus de la méthode NS indique que la valeur $Kn_m = 0.3$ constitue bien une borne supérieure pour la méthode continue.
2. Pour des nombres de Knudsen supérieur à 0.5 allant ici, jusqu'à 0.7, l'analyse statistique des données a montré qu'un modèle quadratique était plus pertinent que le modèle linéaire. Cette approche quadratique paraît intéressante sur le plan pratique car les résultats que nous obtenons pour les coefficients du second ordre sont plus précis que ceux proposés dans la littérature (Maurer *et al.* (2003)). Toutefois pour des raisons analogues à celles données pour l'intervalle $[0 - 0.5]$, on ne peut garantir que cette modélisation puisse être basée sur une approche continue de l'écoulement complet. Par conséquent l'approche quadratique concernant le débit sur le domaine $Kn_m \in [0 - 0.7]$ sera plutôt considérée pour l'instant comme une approche empirique pouvant servir pour la conception et la réalisation de microsystèmes fonctionnant dans des conditions proches de notre étude.

5.1 Régime de glissement pour le microcanal expérimental

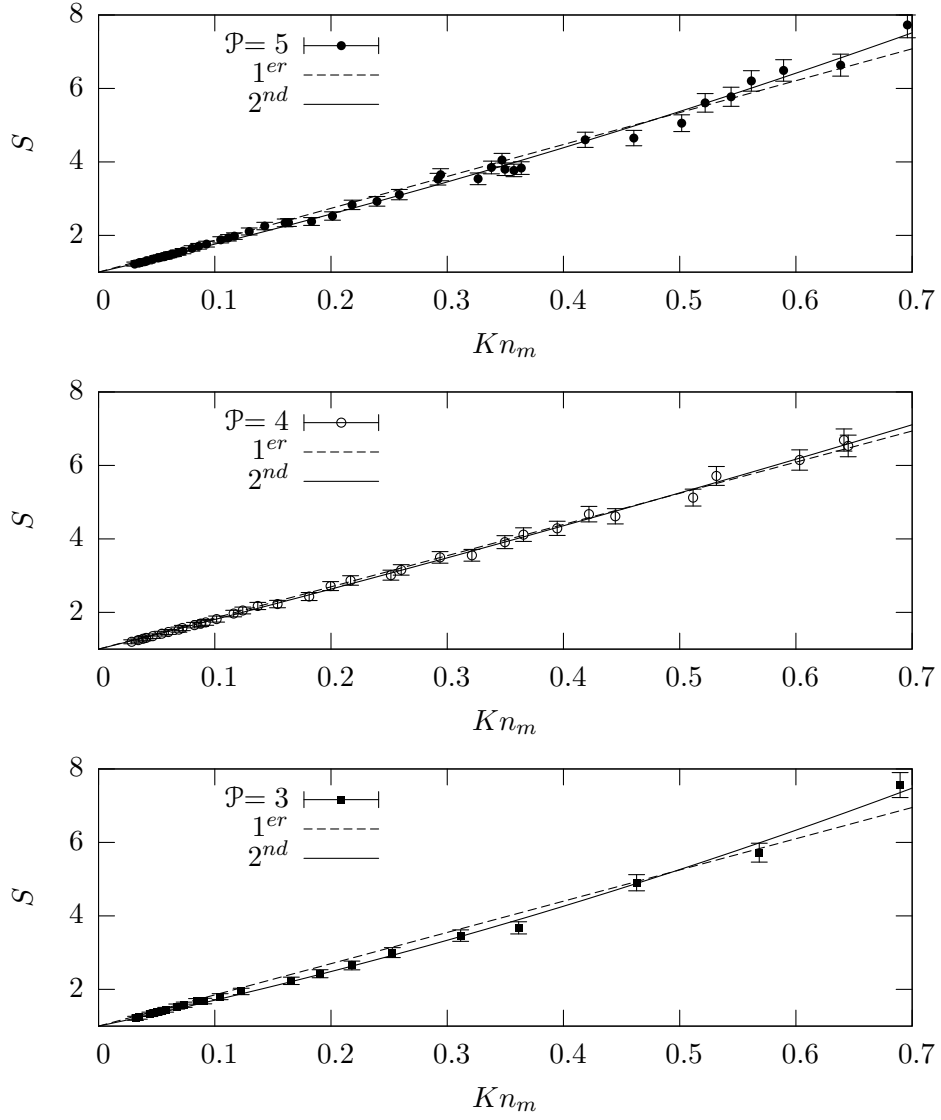


FIGURE 5.1 – Débits massiques adimensionnés obtenus d'après l'équation (2.15). Les différents types de lignes représentent les approximations polynomiales du premier degré (trait pointillé) ou second degré (trait plein). Les différents symboles des rapports de pression \mathcal{P} sont : 3 ■, 4 ○, 5 ● .

5. RÉSULTATS DANS LES MICROCANAU

5.1.2 Effet du premier ordre dans le régime de glissement

En accord avec les conclusions énoncées dans le paragraphe précédent, nous avons étudié d'un point de vue théorique l'intervalle de Knudsen $[0 - 0.3]$ à travers une modélisation du régime de glissement du premier ordre. Nous estimons les coefficients théoriques figurant de (2.15) à l'aide des coefficients expérimentaux figurant dans l'expression (2.17). Le coefficient A_1 s'exprime par :

$$A_1 = \frac{\sigma_p^{1er}}{k_\lambda} = \frac{A_1^{exp}}{6}. \quad (5.2)$$

Cette relation nous permet d'obtenir une estimation des coefficients de glissement σ_p^{1er} . Ils sont présentés dans la table 5.3. Comme dans les microtubes, en général ces résultats ne semblent pas être influencés significativement par le rapport de pression.

$Kn_m \in [0 - 0.3]$					
\mathcal{P}	α_M^{1er}	σ_p^{1er}	α_M^{2nd}	$\sigma_p^{2nd\clubsuit}$	$\sigma_{2p}^{2nd\clubsuit}$
5	0.834 ± 0.005	1.226 ± 0.011	0.884 ± 0.014	1.119 ± 0.030	0.186 ± 0.023
4	0.841 ± 0.004	1.221 ± 0.009	0.865 ± 0.012	1.162 ± 0.027	0.107 ± 0.046
3	0.874 ± 0.004	1.142 ± 0.007	0.896 ± 0.009	1.093 ± 0.009	0.091 ± 0.031
3-5	0.847 ± 0.002	1.204 ± 0.007	0.878 ± 0.009	1.133 ± 0.020	0.129 ± 0.034
$Kn_m \in [0 - 0.5]$					
5	0.846 ± 0.004	1.208 ± 0.009	0.844 ± 0.012	1.215 ± 0.029	-0.007 ± 0.029
4	0.840 ± 0.003	1.223 ± 0.005	0.841 ± 0.010	1.221 ± 0.023	0.002 ± 0.024
3	0.864 ± 0.004	1.165 ± 0.008	0.910 ± 0.014	1.093 ± 0.030	0.132 ± 0.035
3-5	0.847 ± 0.003	1.207 ± 0.005	0.857 ± 0.008	1.183 ± 0.018	0.026 ± 0.019

TABLE 5.3 – Coefficients expérimentaux d'accommodations tangentiels α_M^i et de glissement σ_p^i en fonction de l'ordre de la modélisation, calculé à partir des données expérimentales en utilisant la relation (5.2) et (2.5). Les coefficients de glissement σ_p^{2nd} et σ_{2p}^{2nd} sont donnés à titre indicatifs (symbole \clubsuit) car on a vu que la modélisation du second ordre n'est pas pertinente sur ces intervalles de Knudsen.

Nous comparons maintenant nos résultats expérimentaux avec ceux de la littérature, plus particulièrement avec les résultats expérimentaux de Porodnov *et al.* (1974) (table 5.4). Les auteurs de cette étude ont supposé une dépendance linéaire du débit massique par rapport au nombre de Knudsen : cette hypothèse se justifie ici par le domaine de faibles Knudsen exploré ($Kn_m < 0.04$). Le coefficient de glissement est alors proportionnel aux débits massiques. Cependant, leurs conditions expérimentales sont différentes des nôtres sur deux autres points. Premièrement leur variation de pression est bien plus petite que la notre ; il en va donc de même pour l'ordre de grandeur du gradient local de pression. Deuxièmement la rugosité des parois n'est pas du tout la même : Porodnov *et al.* (1974) utilisent comme matériaux du verre qui a deux rugosités différentes. La première rugosité varie entre $1 - 5 \mu m$ ce qui correspond à $1.1 - 5.6 \%$ de la hauteur du canal, la deuxième rugosité moyenne est de $\sim 0.05 \mu m$ (verre poli), *i.e.* 0.055%

5.1 Régime de glissement pour le microcanal expérimental

Coefficients	α_M	α_L	σ_p^{1st}
Porodnov et al. (1974)**†	0.893 ± 0.005	0.958 ± 0.005	1.099 ± 0.020
Porodnov et al. (1974)***†	0.803 ± 0.006	0.862 ± 0.006	1.320 ± 0.010
Colin et al. (2004)*‡	0.93	0.99	1.02
Maurer et al. (2003)*‡	0.87 ± 0.03	0.98 ± 0.03	1.06 ± 0.07
Nos résultats*†	0.847 ± 0.003	0.908 ± 0.003	1.207 ± 0.005
Cercignani & Daneri (1963)^T	0.886	1	1.016

TABLE 5.4 – Coefficients théoriques et expérimentaux d’accommodations tangentiels (α) pour des écoulements l’hélium (* silicium, ** verre, *** verre poli, ^T valeur théorique, † modélisation premier ordre, ‡ modélisation du second ordre). Nos résultats utilisent l’ensemble des données expérimentales de la table 5.2 sur l’intervalle de Knudsen $[0 - 0.3]$, ($\mathcal{P} = 3 - 5$).

de cette hauteur. Dans nos expériences, la rugosité de notre microcanal a été estimée inférieure à 20 nm , *i.e.* une valeur relative de 0.2% de la hauteur de microcanal. C’est une valeur intermédiaire par rapport à la rugosité des deux surfaces de [Porodnov et al. \(1974\)](#). Notre valeur expérimentale du coefficient de glissement est bien comprise entre les deux valeurs de [Porodnov et al. \(1974\)](#) ce qui semble confirmer l’influence de la rugosité sur les résultats. En tout cas, compte tenu des différences entre les conditions expérimentales nos résultats peuvent être estimés comme globalement en accord avec ceux obtenus par [Porodnov et al. \(1974\)](#).

A partir de l’estimations des coefficients de glissement, nous pouvons déduire les coefficients d’accommodation (dérivé du «scattering-kernel» de Maxwell) en utilisant l’équation (2.5) de Maxwell ou la relation 2.6 de Loyalka. Cette dernière prend en compte l’effet de la couche de Knudsen. Les résultats de ces calculs sont présentés dans le tableau 5.4 et comparés avec différents résultats issus de la littérature. Les auteurs cités dans le tableau 5.4 utilisent des techniques de mesures variées dans des microcanaux dont la nature des parois est différentes. Une analyse comparée de toutes ces données sort du cadre de ce travail, néanmoins il nous a semblé intéressant de les rassembler en vue d’une analyse ultérieure plus poussée.

Nous verrons par la suite qu’il est aussi possible d’obtenir le coefficient d’accommodation avec l’aide des résultats numériques de la résolution de l’équation BGK ([Loyalka \(1975\)](#)) notamment pour des régimes plus raréfiés. Nous comparerons plus loin les différentes valeurs de α ainsi obtenues.

5.1.3 Effet du second ordre en régime de glissement ou modélisation quadratique du débit $Kn_m \in [0 - 0.7]$?

Les coefficients du second ordre de l’approximation polynomiale quadratique (A_2^{exp} et B_2^{exp}) sont présentés dans la table 5.2. Les coefficients statistiques, montrent comme on l’a dit précédemment, que le coefficient B_2^{exp} n’est justifié que sur l’intervalle de

5. RÉSULTATS DANS LES MICROCANAU

Knudsen $[0 - 0.7]$. Des expériences voisines des nôtres ont été effectuées par [Maurer et al. \(2003\)](#) qui ont interprété leurs résultats à l'aide d'une modélisation du second ordre pour des nombres de Knudsen allant jusqu'à 0.8, *i.e.* proche de notre intervalle d'étude. Leurs résultats sont reportés dans la table 5.5. Tout d'abord il apparaît que leur coefficient B_2^{exp} est affecté d'une très forte incertitude. Dans nos travaux cette erreur est plus faible que dans les résultats de [Maurer et al. \(2003\)](#). Malgré tout les résultats expérimentaux respectifs peuvent être considérés comme globalement en bon accord. Dans le but de pousser plus loin la comparaison avec ces auteurs, nous avons porté à titre purement indicatif des valeurs de coefficient de glissement de second ordre qui pour nous, compte tenu de l'analyse précédente, sont purement fictifs. Ces grandeurs sont affectées du symbole ♣ dans le tableau 5.5.

Coefficients	A_2^{exp}	B_2^{exp}	$\sigma_p^{2nd\clubsuit}$	σ_{2p}^\clubsuit	Kn_m
Maurer et al. (2003)	7.20 ± 0.30	2.76 ± 1.2	1.06 ± 0.07	0.18 ± 0.08	$[0-0.8]$
Nos résultats	7.57 ± 0.13	2.02 ± 0.24	1.119 ± 0.018	0.133 ± 0.007	$[0-0.7]$

TABLE 5.5 – Coefficients expérimentaux. Les coefficients de glissement du premier σ_p^{2nd} Les coefficients de second σ_{2nd} ordre sont donnés à titre purement indicatif (symbole ♣). Selon notre analyse ils n'ont pas de sens de physique clairs sur ces intervalles de Kn_m

5.2 Régime transitionnel et moléculaire libre

Les débits massiques pour le régime transitionnel et moléculaire libre sont présentés sur la figure 5.2 sous une forme adimensionnée selon l'équation (2.18) pour les rapports de pressions $\mathcal{P} = 3, 4$ et 5. Les résultats sont tracés en fonction du paramètre de raréfaction δ_m de l'équation (2.20) qui est calculé avec la pression moyenne de l'expérience. La comparaison des résultats obtenus pour des rapport de pression différents sous-entend qu'il n'y a pas d'influence significative du rapport de pression sur les résultats, ce qui est généralement la cas dans le régime de glissement

Le premier modèle théorique que nous utilisons pour comparer nos débits est le modèle cinétique BGK ([Sharipov \(1999b\)](#)) dont la modélisation a déjà été commentée dans le chapitre 2. Cet auteur a obtenu une solution numérique de l'équation BGK dans des microcanaux pour différents rapports d'aspect H/w et pour une accommodation complètement diffuse à la paroi. Ces résultats sont disponibles sous la forme de débit adimensionnée $\Sigma(\delta)$ (équation (2.19)); ils nécessitent l'hypothèse «des faibles gradient de pression adimensionné» relation (2.18), ce qui est toujours vérifié dans les microconduits même si le gradient de pression réel est important, car le rapport $R/L \ll 1$. Mais par contre d'autres hypothèses explicites ou non sont plus discutables. Parmi celles-ci on peut relever que la forme adimensionnée Σ est supposée ne dépendre localement que de δ *e.g.* de la pression et non pas du gradient de pression.

Pour comparer nos résultats expérimentaux obtenus avec des variations de pression

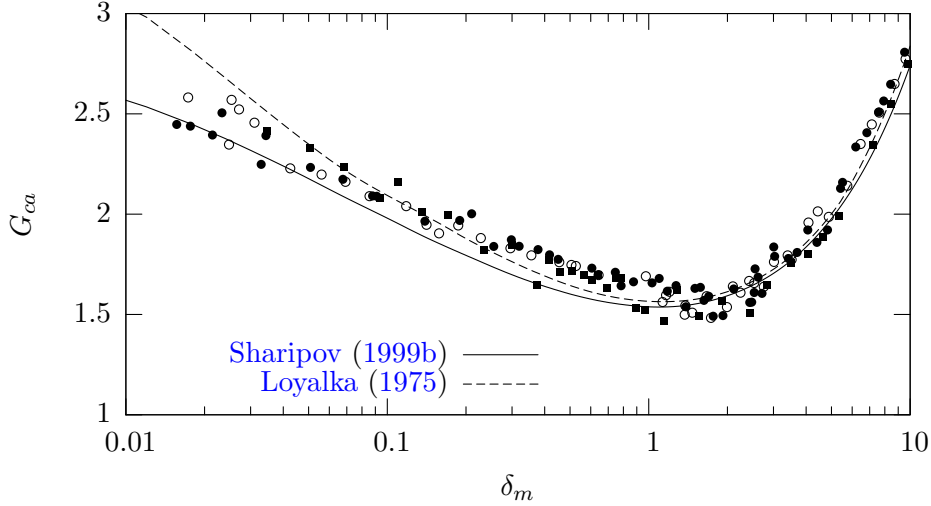


FIGURE 5.2 – Débits massiques adimensionnés d’après l’équation (2.21) dans un microcanal pour trois rapports de pression différents avec les courbes théoriques de Sharipov (1999b) (trait plein, microcanal, $H/w = 0.02$) et Loyalka (1975) (trait pointillé, plaque parallèle). Les différents symboles des rapports de pression \mathcal{P} sont : 3 ■, 4 ○, 5 ●.

importantes dans le microcanal, nous devons d’abord les mettre sous la forme adimensionnée (2.21). Ensuite, selon la méthode de l’auteur, nous devons intégrer la quantité Σ théorique suivant δ , selon l’équation (2.22), pour prendre en compte les variations du paramètre de raréfaction réel comme nous l’avons mentionné dans le paragraphe 2.3.1 page 35. Sur la figure 5.2, le débit massique théorique ainsi calculé est présenté sous la forme G_{ca} par une courbe en traits pleins. Sur cette même figure est représentée aussi la même forme d’expression théorique (2.22) obtenue à partir des résultats tabulés de Loyalka (1975) : précisons que ces résultats tabulés sont obtenus sous les mêmes hypothèses générales que le Σ de Sharipov (1999b). De plus sur la figure 5.2 le calcul théorique de Loyalka (1975) est effectué comme celui de Sharipov (1999b) pour une accommodation totale à la paroi mais il s’en différencie par le fait qu’il modélise deux plaques parallèles.

En régime de glissement et au début du régime transitionnel les différences entre les débits massiques adimensionnés donnés par ces deux modèles théoriques sont faibles. Cependant, au cours du régime transitionnel une différence apparaît entre les résultats des deux approches et cette différence devient plus importante au début du régime moléculaire libre ($Kn_m \in [8.9 - 12.7]$ ou $\delta_m \in [0.07 - 0.1]$). Si on les compare à ces modèles, le comportement de nos résultats expérimentaux peut paraître un peu surprenant : au cours du régime transitionnel, et jusqu’au début du régime moléculaire libre ($0.6 < Kn_m < [8.9 - 12.7]$, ou $1.5 > \delta_m > [0.07 - 0.1]$) les mesures obtenues pourtant dans un conduit de largeur limitée, sont plus proches de la courbe de Loyalka (1975) que de celle de Sharipov (1999b) ; cela semble indiquer que, dans le régime transitionnel,

5. RÉSULTATS DANS LES MICROCANNAUX

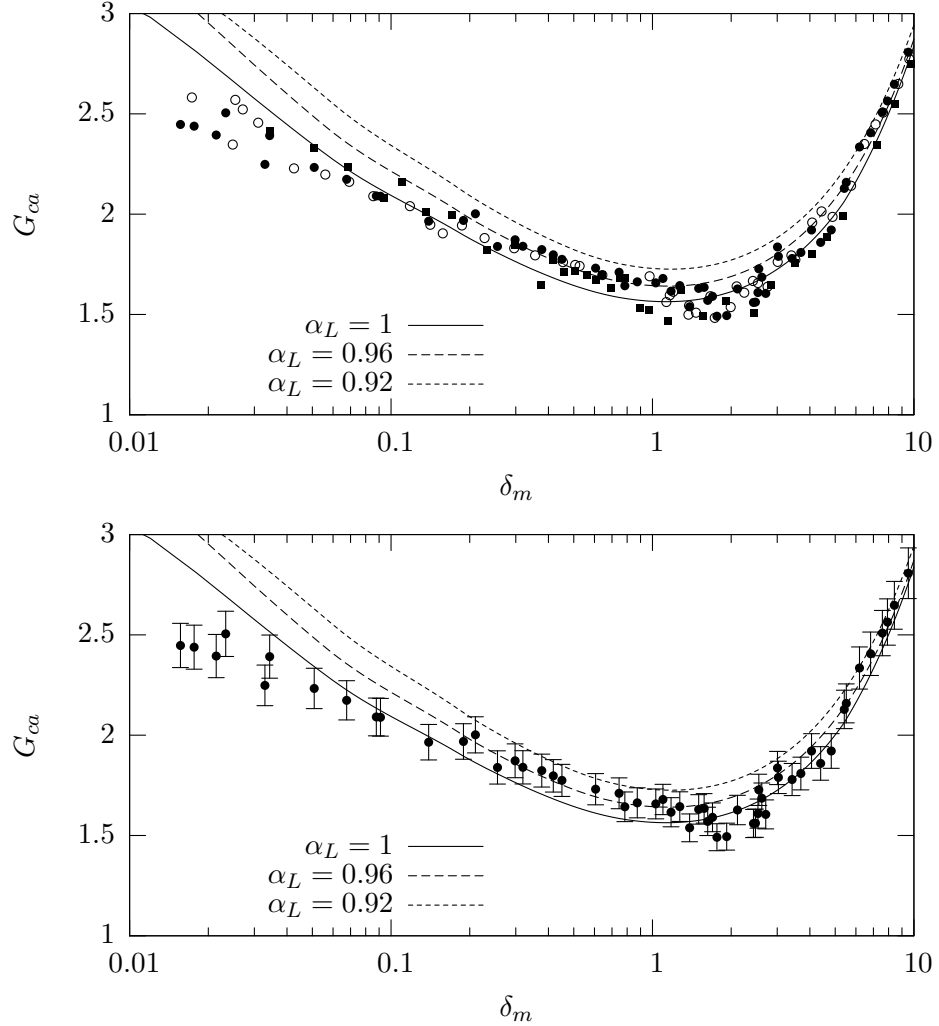


FIGURE 5.3 – Débits massiques adimensionnés d'après l'équation (2.21) dans un micro-canal pour trois rapports de pression différents avec les courbes théoriques de Loyalka (1975) pour trois coefficients d'accommodation différents. Les différents symboles des rapports de pression \mathcal{P} sont : 3 ■, 4 ○, 5 ●.

l'influence des parois latérales n'est pas suffisante pour différencier le cas $H/w = 0.019$ (correspondant au canal réel) du cas $H/w = 0.0$ qui correspond au traitement théorique de Loyalka (1975). Mais quand le nombre de Knudsen croît dans le régime moléculaire libre et que $Kn_m \rightarrow \infty$ (*i.e.* $\delta_m \rightarrow 0$), le comportement asymptotique de la courbe théorique de Loyalka (1975) ne correspond plus à nos mesures : pour $Kn_m \in [15 - 50]$ *i.e.* $\delta_m \in [0.17 - 0.06]$ nos résultats s'éloignent de plus en plus de la solution de Loyalka (1975) pour se rapprocher de celle prédite par Sharipov (1999b).

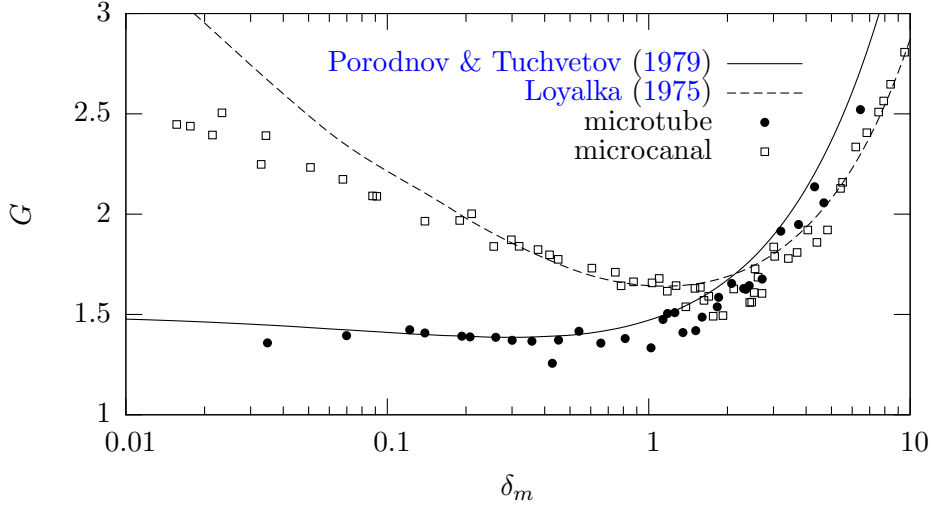


FIGURE 5.4 – Comparaisons des débits massiques d’hélium adimensionnés selon l’équation (2.21) dans un microtube et un microcanal pour $\mathcal{P} = 5$. Les deux courbes théoriques Loyalka (1975) et Porodnov & Tuchvetov (1979) sont tracées pour le coefficient d’accommodation le mieux adapté : $\alpha_L = 0.96$ pour le microcanal et $\alpha_L = 1$ pour le microtube.

En complément, pour évaluer le coefficient d’accommodation à la paroi, nous utilisons des résultats complémentaires de Loyalka (1975) qui a donné numériquement les solutions de l’équation cinétique BGK avec des conditions spéculaire-diffuse de Maxwell à la paroi. Ces résultats numériques, soumis au traitement définis par l’équation (2.22), sont présentés avec nos débits expérimentaux adimensionnés sur la figure 5.3 pour des coefficients α_L variant entre 0.92 et 1. Cette nouvelle comparaison fait ressortir deux résultats.

Premièrement, l’étude de l’intervalle de Knudsen intermédiaire défini précédemment ($0.6 < Kn_m < [8.9 - 12.7]$, ou $[0.07 - 0.1] < \delta_m < 1.5$), montre que l’influence de l’accommodation à la paroi va croissant quand le milieu devient plus raréfié (figure 5.3) : on constate en effet que l’écart entre les courbes correspondant à différentes accommodations augmente. De plus, d’après les commentaires précédents sur l’influence du rapport H/w dans le régime transitionnel (qui correspond à l’intervalle précisé ci-dessus), nos résultats se raccordent à Loyalka (1975) (avec $\alpha_L < 1$), tandis que vers le régime moléculaire libre l’approche de Sharipov (1999b) (avec $\alpha_L = 1$) s’avère meilleure. Cela signifie aussi que lorsque la raréfaction augmente, *i.e.* lorsque les collisions gaz/paroi deviennent plus importantes que les collisions gaz/gaz, l’augmentation de l’influence de la paroi sur l’écoulement passe d’abord par le phénomène d’accommodation et seulement ensuite par le rapport d’aspect et la géométrie des surfaces.

Deuxièmement, un bon accord avec les mesures de Loyalka est trouvé pour $\alpha_L = 0.96$ sur l’intervalle $\delta_m \in [0.1 - 1]$ (régime transitionnel). Ce résultat confirme qu’une

5. RÉSULTATS DANS LES MICROCANaux

accommodation totale à la paroi est inappropriée, tant dans le régime transitionnel que dans le régime de glissement. De plus, il semble indiquer, *a priori*, que pour des écoulements isothermes d'hélium, quand une unique approche théorique cinétique est appliquée, un seul coefficient d'accommodation est trouvé dans le régime de glissement et transitionnel : de plus la valeur de ce coefficient ($\alpha = 0.96$) s'écarte de la valeur trouvée avec la méthode continue en régime de glissement ($\alpha = 0.91$) au delà de ce que semble permettre l'erreur expérimentale.

Toutefois ce commentaire qui ressort d'un examen global des courbes données sur la figure 5.3 doit être nuancé à la lumière d'un examen plus détaillé. En effet dans la zone du transitionnel proche on peut déceler une rupture dans l'allure des points expérimentaux, qui survient autour de $\delta = 1.3$ et qui rappelle celles constatées lors de l'étude du régime transitionnel, dans le tube de diamètre $D = 50\ \mu m$ (cf. section 4.2). La présence dans cette zone de nombreux points expérimentaux s'écartant de la courbe théorique au delà de la distance permise par les barres d'erreur, jette un doute sur la pertinence de la modélisation cinétique dans cette plage (cf. l'explication donnée à la fin de la section 5.3). Il en découle une interrogation sur le degré d'exactitude des valeurs du coefficient d'accommodation déduites de la méthode cinétique, dans la zone du régime transitionnel proche et peut être en régime de glissement. Enfin à titre de comparaison, nous traçons sur le même graphique (figure 5.4) les débits massiques adimensionnés obtenus respectivement dans le microcanal et dans le microtube de $50\ \mu m$ de diamètre (paragraphe 4.2 page 87). On note sur la figure 5.4 que l'intersection des deux courbes théoriques se situe au même δ_m que l'intersection des points expérimentaux. Les deux courbes théoriques reproduisent aussi assez correctement le comportement asymptotique des débits expérimentaux vers le régime moléculaire libre.

Finalement si nous considérons à la fois l'incertitude de nos mesures, l'influence éventuelle de la largeur finie du microcanal, l'imperfection des différentes modélisations, les comparaisons entre les résultats expérimentaux et les résultats théoriques rapportés peuvent être considérés comme globalement satisfaisants, même si quelques écarts demeurent encore en partie inexpliqués.

Pour comparer nos mesures à une approche théorique mieux adaptée il faudrait disposer d'un modèle cinétique combinant les propriétés du modèle de Loyalka (1975) (*i.e.* une approche paramétrée en α) et celles du modèle de Sharipov (1999b) (*i.e.* tenant compte de rapports d'aspects non nuls H/w). Malheureusement, à notre connaissance, le seul travail existant dans cette direction Loyalka *et al.* (1976) concerne une valeur de $H/w = 1$, *i.e.* très éloignée du rapport d'aspect de notre microcanal.

5.3 Résultats dans le microcanal «numérique» : calcul de Monte Carlo

5.3.1 Canal de $9.38 \mu m \times 492 \mu m \times 1 mm$: similitude

Notre simulation de type Monte Carlo a deux objectifs. Premièrement, elle nous fournira des profils de vitesses dans tous les régimes et à ce titre elle contribuera à fixer les limites du régime de glissement. Deuxièmement, elle doit représenter une modélisation complémentaire pour l'analyse du régime transitionnel dans la gamme $Kn_m \in [1 - 10]$. Dans les deux cas, l'idéal aurait été de modéliser le microcanal dans sa totalité, néanmoins procéder de la sorte eût été extrêmement coûteux en temps de calcul. C'est pourquoi, le microcanal modélisé reproduit deux plaques parallèles d'une longueur égale au dixième de la longueur expérimentale. La schématisation du microcanal par deux plaques parallèles n'est pas gênante car nous avons vu dans le paragraphe précédent que les effets des parois latérales ne devenaient importants que lorsque $Kn_m > 15$; or, ici l'utilisation de la simulation de Monte Carlo sera limitée à des $Kn_m < 10$. La longueur est pour sa part réduite dans des proportions importantes ($1 mm$ au lieu de $9.39 mm$). Néanmoins nous veillerons à ce que la longueur du canal simulé reste au minimum 10 fois supérieures au libre parcours moyen pour éviter d'introduire des effets de raréfaction intempestifs provenant de cette réduction supplémentaire de l'espace.

Comme on l'a exposé au chapitre (3) section (3.7.1), on justifie cette réduction de dimension en admettant des principes de similitude basés sur les expressions analytiques approchées que l'on peut établir en régime de glissement. Pour étayer ce principe en régime plus raréfié on a eu recours à quelques tests numériques en régime transitionnel et par ailleurs on s'est basé aussi sur l'analyse de (Lengrand *et al.* (2006)) en régime moléculaire libre.

5.3.2 Profils de vitesses en régime de glissement

Pour étudier les profils de vitesses en régime de glissement $Kn_m \in [0 - 0.3]$, nous allons utiliser la «fonction zoom», que nous avons développée (voir chapitre 3). La fonction zoom est ici construite sur une suite géométrique 4^n avec $n \in [0 : 3]$ ainsi le nombre maximum de cellules pour une section du microcanal est de 64. Nous allons comparer les profils de DSMC avec les profils analytiques de l'équation (2.12). D'une part nous comparons les résultats des deux approches dans le cas idéal de l'accommodation totale, d'autre part nous les comparons aussi lorsque l'on utilise le coefficient d'accommodation tiré de nos mesures expérimentales qui reflètent une accommodation partielle ($\alpha = 0.91$). Enfin nous estimons l'influence du coefficient d'accommodation du lors du passage de la valeur théorique $\alpha = 1$ au $\alpha = 0.91$ expérimental.

Sur la figure 5.5a, on a tracé les profils correspondant à un nombre de Knudsen moyen légèrement supérieur à $Kn_m = 0.1$. On peut distinguer les profils obtenus à partir des équations NS pour des conditions limites du premier ordre avec deux coefficients de glissements différents obtenus tout deux pour une accommodation totale à la

5. RÉSULTATS DANS LES MICROCANaux

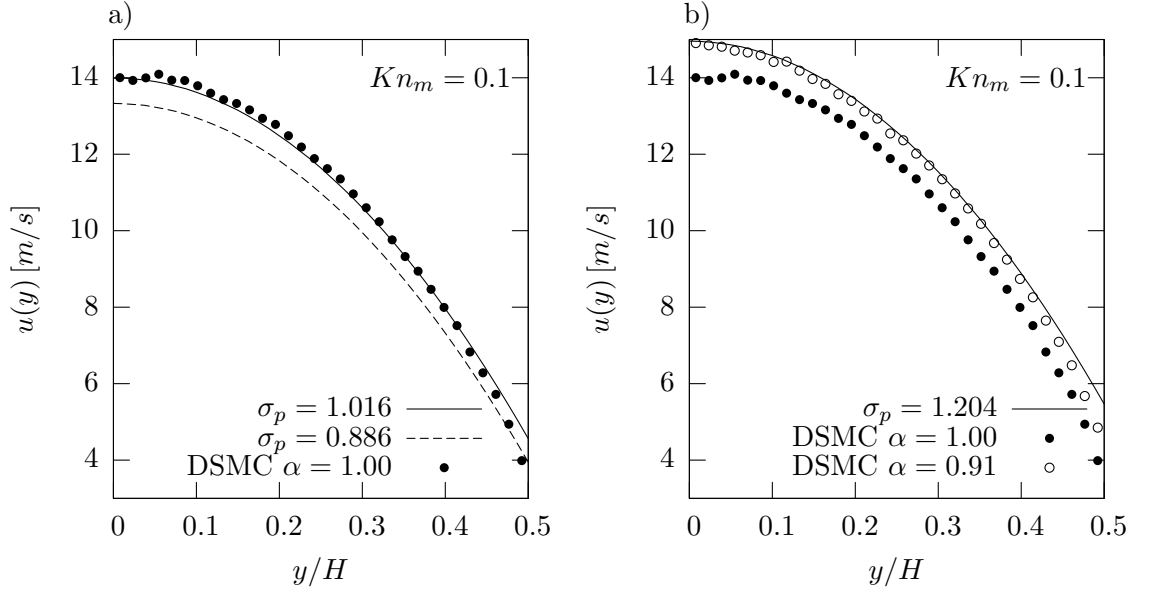


FIGURE 5.5 – a) Profil de vitesse en $[m/s]$: la ligne continue provient de l'équations (2.12) avec $\sigma_p = 1.016$, la ligne en pointillée représente la même solution mais pour $\sigma_p = \sqrt{\pi}/2$. Les \bullet représentent le calcul de la simulation pour $\alpha = 1$. b) Profil de vitesse en $[m/s]$: la ligne continue est la solution des équations continues avec $\sigma_p = 1.204$ i.e. $\alpha = 0.91$). Les \bullet représentent le calcul de la simulation pour $\alpha = 1$, et les \circ montrent le résultat de la simulation pour $\alpha = 0.91$. Tous ces calculs sont effectués pour $Kn_m = 0.1128$.

paroi ($\alpha = 1$) : le premier $\sigma_p = \sqrt{\pi}/2$ est le coefficient historique obtenu par [Maxwell \(1878\)](#) à l'aide d'un bilan de quantité de mouvement qui néglige les effets de la couche de Knudsen, le second $\sigma_p = 1.016$ calculé par [Albertoni et al. \(1963\)](#), prend en compte l'influence de la couche de Knudsen et fait autorité pour des parois complètement diffuses. Enfin on trouve aussi sur la figure le tracé de nos résultats numériques de DSMC pour l'accommodation totale ($\alpha = 1$). La comparaison entre ces différents tracés montre que la solution analytique théorique (surtout celle obtenue avec le σ_p [Albertoni et al. \(1963\)](#)) donne d'excellents résultats sauf dans une zone très proche de la paroi (couche de Knudsen) dont l'épaisseur est estimée à $\sim \lambda/2$ (on reviendra sur cet aspect du profil à la fin du paragraphe). D'autre part les expériences en microcanal présentées dans le paragraphe 5.1 ont montré que, pour ce domaine de Kn_m , la valeur expérimentale du coefficient de glissement pour un écoulement d'hélium était : $\sigma_p = 1.204$, i.e. 0.91 pour le coefficient d'accommodation, comme nous l'avons indiqué dans l'introduction de ce paragraphe. Ces résultats ont permis de calculer le profil de vitesse analytique pour $\sigma_p = 1.204$. Sur la figure 5.5b ce profil analytique est comparé avec les profils donnés par la modélisation DSMC : les profils de Monte Carlo sont calculés d'une part à l'aide du coefficient d'accommodation expérimental $\alpha = 0.91$ correspondant à nos mesures et d'autre part avec le coefficient $\alpha = 1$ correspondant à une accommodation totale. On

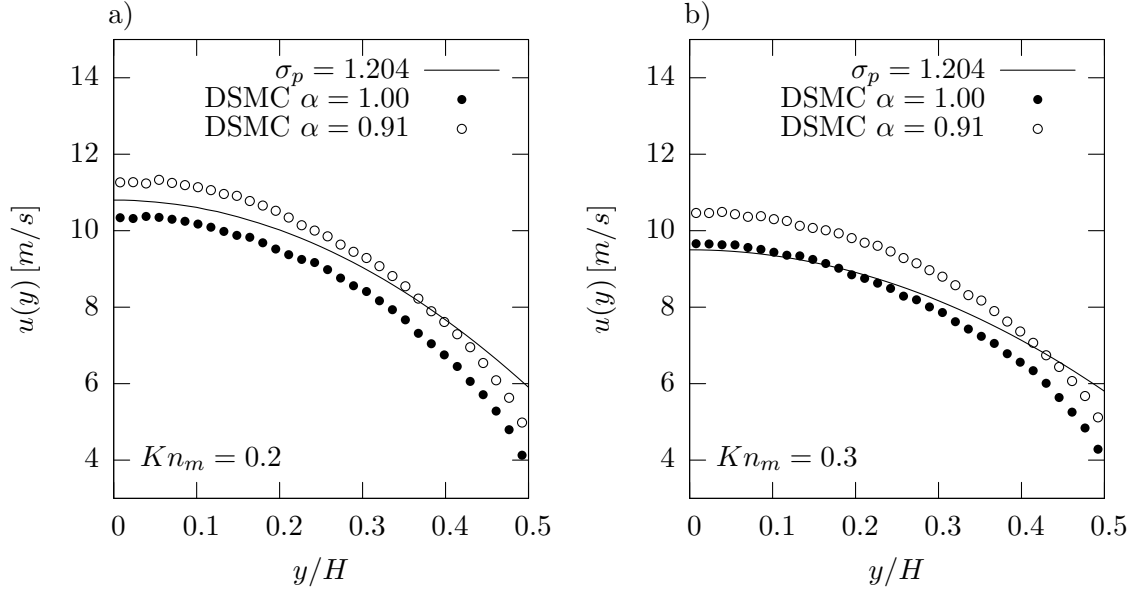


FIGURE 5.6 – a) Profil de vitesse en $[m/s]$: la ligne continue est la solution des équations continues (2.12) avec $\sigma_p = 1.204$ i.e. $\alpha = 0.91$. Les \bullet représentent le calcul de la simulation pour $\alpha = 1$ et les \circ montrent le résultat de la simulation pour $\alpha = 0.91$, les calculs sont effectués pour $Kn_m = 0.2256$. b) Profil de vitesse en $[m/s]$: la ligne continue est la solution des équations continues avec $\sigma_p = 1.204$. Les \circ montrent le résultat de la simulation pour $\alpha = 0.91$, les calculs sont effectués pour $Kn_m = 0.2973$.

peut constater d'abord que les approches DSMC et continue correspondant aux mêmes $\alpha = 0.91$ sont en très bon accord sauf dans la couche de Knudsen. On peut constater ensuite que le passage entre l'accommodation totale et l'accommodation spéculaire diffuse ($\alpha = 0.91$) a un impact sur l'ensemble du profil de vitesses : quand le coefficient d'accommodation diminue de 1 à 0.91, on voit que la vitesse à la paroi et la vitesse sur l'axe de symétrie augmentent simultanément.

On a vu sur les figures 5.5 que même pour un Kn_m relativement faible (~ 0.1) l'adéquation entre les profils continus et les profils cinétiques (DSMC) ne peut se prolonger jusqu'à la paroi. Cela tient à la nature fictive de la vitesse de glissement u_s introduite dans l'approche continue : u_s ne représente pas la vitesse du gaz à la paroi mais la vitesse qui permet de corriger l'approche NS jusqu'à l'entrée de la couche de Knudsen dont l'épaisseur est finalement négligée au niveau de la description macroscopique. Une évaluation de la vitesse réelle de glissement a été obtenue par Cercignani (1990) par la résolution de l'EBL pour le problème de Kramer pour une accommodation totale à la paroi. La valeur réelle de la vitesse de glissement à la paroi (vitesse du gaz à la paroi) peut être exprimée en fonction de la vitesse fictive de glissement u_s (provenant de l'équation (2.4)) habituellement utilisée comme condition limite pour la résolution des équations NS. Dans le cas d'une accommodation totale à la paroi, Cercignani (1990) montre que $u_{gaz} = \frac{u_s}{\sqrt{2\sigma_p}} \sim 0.696$. On peut donc estimer la vitesse

5. RÉSULTATS DANS LES MICROCANaux

réelle du gaz à la paroi à partir de la vitesse de glissement. Dans notre cas pour une modélisation continue, avec $Kn_m = 0.1128$ et pour une accommodation totale à la paroi, la relation de Cercignani permet d'obtenir $u_{gaz} = 3.3 \text{ m/s}$. Par ailleurs dans les mêmes conditions la simulation de Monte Carlo nous donne une vitesse $u_{gaz} = 3.6 \text{ m/s}$. On voit donc que par l'approche continue on peut finalement remonter à une vitesse réelle à la paroi assez proche de celle donnée par la simulation de Monte Carlo. L'information sur cette vitesse est très importante puisqu'elle est nécessaire pour calculer le coefficient de frottement à la paroi.

Enfin sur les figures 5.6 on a tracé les mêmes profils que sur la figure 5.5b mais pour des nombres de Knudsen plus élevés. Sur la figure 5.6a on a représenté le cas $Kn_m = 0.2256$. On voit que les profils ne sont pas ici en parfait accord : le profil analytique sousestime la valeur de la vitesse sur l'axe et la surestime à la paroi : cependant ces différences ne dépassent guère 5%. Sur la figure 5.6b, avec l'augmentation du nombre de Knudsen ($Kn_m = 0.2973$), la différence entre les profils de vitesses donnés respectivement par la solution analytique des équations continues et par la simulation de Monte Carlo, augmente. Elle est de l'ordre de 10%. Ce résultat indique probablement que la limite supérieure de validité de l'approche continue est atteinte. Nous avons tenu compte de cette indication pour limiter le domaine d'étude de ce régime dans les paragraphes précédents.

5.3.3 Régime transitionnel et moléculaire libre

Nous allons à présent utiliser notre simulation pour reproduire les expériences que nous avons effectuées dans le microcanal pour un rapport de pression $\mathcal{P} = 3$. Dans ce paragraphe, nous ne nous sommes intéressés qu'aux débits massiques, c'est pourquoi la fonction zoom a été désactivée. Dans ce cas le schéma des cellules est : 24 cellules dans le microcanal et 4 cellules dans chacun des réservoirs. Dans nos calculs DSMC, nous avons privilégié le coefficient α déterminé dans le régime de glissement, notamment parce que la méthodologie utilisée dans ce régime pour déterminer le coefficient d'accommodation, nous semble plus satisfaisante que le contrôle visuel utilisé dans le régime transitionnel et moléculaire libre du paragraphe 5.2 (voir aussi les remarques sur la modélisation développées par Sharipov (1999b) en transitionnel proche au chapitre 2 ainsi qu'à la fin de la section 5.3.3). Les résultats de cette première comparaison sont présentés sur la figure 5.7a.

On voit que la coïncidence DSMC/expériences est bonne sauf peut être au voisinage du régime transitionnel commençant, où l'écart excède très légèrement les erreurs expérimentales. Mais l'aspect le plus important se trouve dans la comparaison faite sur la figure 5.7b entre le profil DSMC précédent ($\mathcal{P} = 3$) et le profil BGK de Loyalka (1975) qui, comme on l'a vu, optimise l'accord du modèle cinétique avec l'ensemble des points expérimentaux (le modèle Loyalka/Sharipov en effet est supposé ne pas dépendre de \mathcal{P}) pour $\alpha = 0.96$. On voit que l'accord entre les deux courbes est parfait si l'on exclut les très forts nombres de Knudsen pour lesquels l'un et l'autre de ces modèles souffrent de ne pas tenir compte de la largeur limitée du microconduit. Dans la mesure où la courbe DSMC a vocation à représenter l'ensemble des points expérimentaux (il faudrait

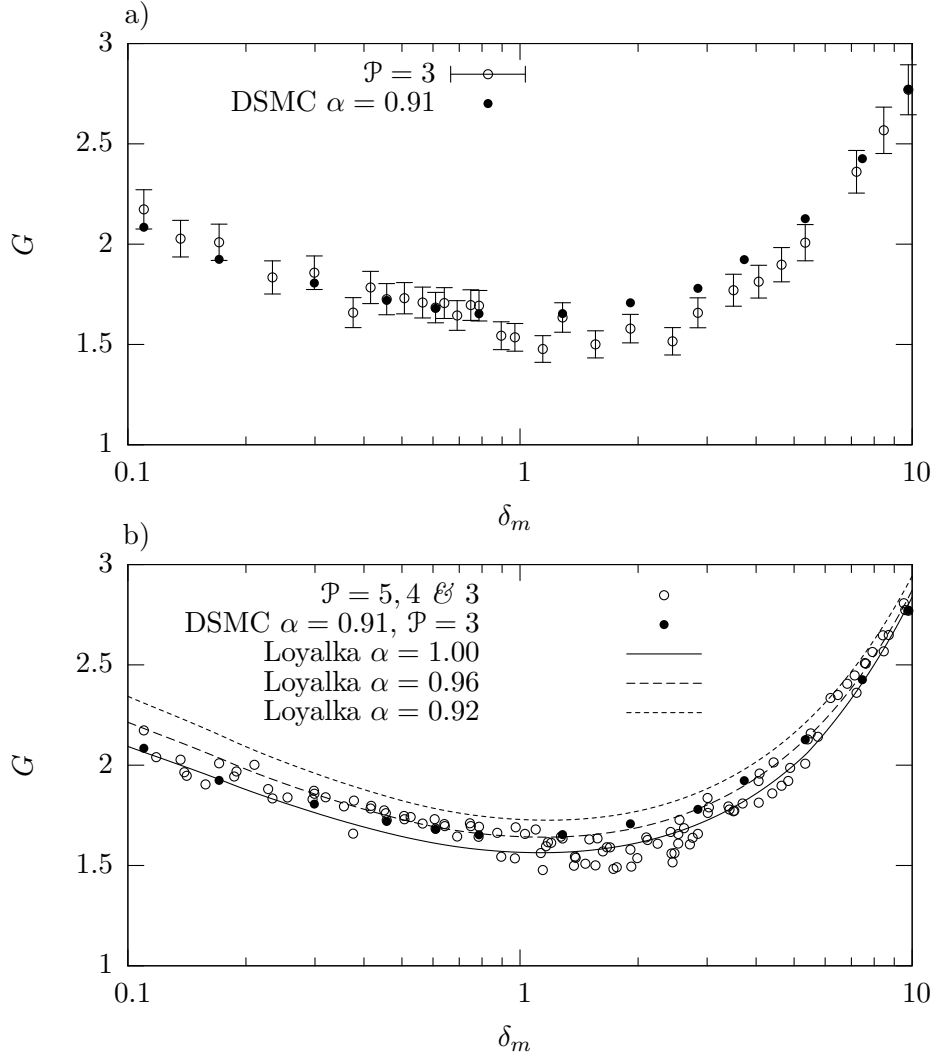


FIGURE 5.7 – Débits massiques expérimentaux, numériques et théoriques, normalisés selon l'équation (2.18) pour des rapports de pression différents $\mathcal{P} = 3, 4$ & 5 .

s'en assurer en testant la sensibilité de la méthode par rapport à \mathcal{P}), cette comparaison plaide en faveur d'une valeur du coefficient d'accommodation α plus proche de 0.91 (provenant de l'étude continue) que de 0.96 (provenant de l'approche cinétique) et cela sur l'ensemble des régimes.

Finalement notre simulation DSMC est un outil performant pour modéliser nos résultats concernant le débit massique et surtout pour calculer les profils de vitesse. La fonction zoom est un outil puissant qui permet d'obtenir ces profils tout en diminuant considérablement le temps de calcul. La comparaison des profils de vitesse a montré toute l'importance de la loi de réflexion sur la surface solide et du degré d'accommo-

5. RÉSULTATS DANS LES MICROCANAU

dation du gaz à la paroi.

Conclusions et perspectives

Conclusions

Dans ce travail nous avons étudié différents gaz en écoulements stationnaires isothermes dans différentes géométries planes ou cylindriques de microconduits. L'étude a comporté un volet expérimental, un volet numérique et un volet théorique. On va tenter de résumer ici les principaux résultats et les perspectives qui s'ouvrent au terme de cette première étape.

Une méthode de mesure performante

La méthode de mesure dite «de pression» que nous avons développée au cours de ce travail de recherche est performante et elle nous a donné entière satisfaction. Cette méthode de mesure nous a permis de mesurer quatre décades de débits dans des conditions de mesures idéales. Nous avons ainsi pu explorer l'ensemble des régimes d'écoulements pour différents gaz dans différentes géométries sous l'angle de la mesure du débit massique. De nombreuses données concernant les écoulements gazeux en microconduits ont ainsi été recueillies. Les incertitudes sur cette méthode de mesure ont été estimées avec précision. Les limites de la méthode ne proviennent pas des capteurs mais surtout du système de pompage et d'injection du gaz. En effet, les pressions les plus faibles rencontrées dans les expériences sont de l'ordre d'une dizaine de Pa . Fixer cette pression, avec notre système d'injection est difficile. Espérer obtenir des pressions plus faibles n'est pas envisageable aujourd'hui. De plus pour travailler à des pressions inférieures, le vide des réservoirs devrait être nettement plus poussé pour éviter les problèmes de contamination du gaz d'étude.

Limites du modèle continu avec les conditions du 1^{er} et 2nd ordre

Au cours de nos expériences dans les microtubes, nous avons pu montrer que le choix de conditions limites du second ordre était le plus adapté sur l'intervalle de Knudsen $[0 - 0.3]$ au moins dans la plupart des cas. Les campagnes expérimentales successives dans les différents microtubes ont permis de mettre en évidence que l'effet du second ordre était dépendant du diamètre et augmentait avec la courbure. De même l'étude des différents gaz dans chaque tube permet de conclure que cet effet de second ordre augmente aussi avec la masse moléculaire. Sur ce même intervalle de nombre de

Knudsen, le choix des conditions limites est plus délicat dans les microcanaux. On a vu que pour l'hélium le choix de conditions limites du premier ordre était alors largement suffisante en géométrie plane. Ce résultat semble bien s'expliquer dans le prolongement de ceux que l'on a obtenus en microtubes puisque ici la courbure est nulle ; par ailleurs le gaz considéré est le plus léger de ce que nous avons analysés. Il est donc possible qu'un effet du second ordre puisse être mis en évidence, dans les mêmes conditions, pour des gaz plus lourd. Cette investigation reste à faire. On note aussi que nous avons trouvé, en microcanal, une expression quadratique pertinente du débit sur l'intervalle $Kn_m \in [0 - 0.7]$. Mais nous n'avons pas accordé un statut théorique général de second ordre en Knudsen à ce résultat : la valeur 0.7 nous a paru en effet trop élevée pour cela, notamment à la lumière des calculs DSMC sur les profils de vitesse.

D'autre part on a vérifié aussi que nos résultats expérimentaux conduisent à des coefficients de glissement de premier ordre en assez bon accord avec les résultats classiques de la littérature ([Cercignani & Daneri \(1963\)](#), [Loyalka \(1975\)](#)) même si ces résultats théoriques n'ont pas été obtenus exactement dans les mêmes conditions d'accommodation. L'accord est très nettement moins bon pour les coefficients de glissement du second ordre, sans doute parce que les résultats théoriques explicites donnés dans la littérature) ont été calculés dans des conditions qui sont éloignées des nôtres (absence de gradient longitudinal de vitesse, accommodation totale ([Cercignani \(1964\)](#))).

Les différents régimes d'écoulement. Coefficients d'accommodation

Nos résultats concernant la détermination de l'accommodation dans les microconduits ont montré d'abord que les surfaces des matériaux constituant les parois ne sont pas caractérisées par une réflexion totalement diffuse. D'une manière générale, nous avons mis en évidence l'influence de la masse moléculaire sur ce coefficient : les molécules les plus légères ont des rebonds plus diffusifs à la paroi. On a mis aussi en évidence, même si ce la demande encore confirmation, une faible influence de la courbure sur ce coefficient d'accommodation.

En régime de glissement dans le cadre de l'approche continue le coefficient d'accommodation a d'abord été déduit du coefficient de glissement à l'aide de la modélisation NS.

D'autre part sur l'ensemble des régimes, l'allure des courbes théoriques obtenues, pour $\alpha = 1$, à l'aide du modèle BGK de [Loyalka \(1975\)](#) et [Porodnov & Tuchvetov \(1979\)](#), complété par la méthode d'intégration proposée par [Sharipov \(1999b\)](#) ou bien à l'aide du modèle BGK de [Sharipov \(1999b\)](#)) permet de retrouver l'allure de l'évolution des résultats expérimentaux concernant le débit. Par rapport à ces valeurs expérimentales du débit, ces courbes théoriques donnent une concordance meilleure que l'ordre de grandeur. Ensuite pour déduire des valeurs plus précises des coefficients d'accommodation en régime transitionnel ou moléculaire libre, nous nous sommes référés respectivement aux approches de [Loyalka \(1975\)](#) en microcanal et [Porodnov & Tuchvetov \(1979\)](#) en microtube : en effet ces auteurs fournissent aussi une étude cinétique paramétrée à l'aide de différentes valeurs possibles du coefficient d'accommodation, prenant ainsi en compte une accommodation partielle à la paroi. A notre connaissance il s'agit d'ailleurs des

seules approches abordant le problème sous cet angle. En comparant alors nos résultats expérimentaux aux réseaux de courbes théoriques ainsi obtenues on vérifie d'abord que les modèles cinétiques prévoient que l'influence de l'accommodation sur le débit massique commence à croître quand le régime transitionnel débute (en effet l'écart entre les différentes courbes théoriques du réseau augmente). Puis ces écarts augmentent encore quand on passe du régime transitionnel au moléculaire libre. De même, du point de vue théorique ces courbes font apparaître une influence grandissante du rapport d'aspect hauteur/largeur lorsque la raréfaction approche le régime moléculaire libre (écart grandissant entre le modèle Sharipov (1999b) et les autres). Dans ce régime il devient nécessaire de prendre en compte l'influence des parois latérales même si le rapport d'aspect hauteur/largeur est relativement petit (0.019).

Ensuite on peut comparer, en microcanal, l'évolution de nos points de mesure avec le réseau de courbes de Loyalka (pour différentes accommodations) et avec le modèle de Sharipov (prenant en compte l'effet bidimensionnel de la section limitée du microcanal). On constate alors que quand le nombre de Knudsen augmente les effets des parois se font de plus en plus sentir : d'abord (en régime transitionnel) à travers le coefficient d'accommodation, puis (en régime moléculaire libre) à travers le rapport d'aspect et la géométrie des surfaces.

Enfin d'un façon générale les valeurs des coefficients d'accommodation provenant de l'optimisation de l'accord entre les débits expérimentaux et les courbes données par la théorie cinétique sont plus élevées que celles obtenues par la méthode continue en régime de glissement ; cet écart semble bien dépasser l'écart permis par les barres d'erreur.

- En microtube, les coefficients d'accommodation «cinétiques» paraissent encore plus élevés en régime de glissement que dans les régimes plus raréfiés : pour l'hélium la méthode devrait même conduire à une accommodation supérieur à 1 dans cette zone !
- En microcanal, le coefficient d'accommodation «cinétique» déterminé pour l'hélium, semble *a priori* stable sur l'ensemble des régimes (~ 0.96) et supérieur à celui qu'on trouve en régime de glissement par la méthode continue (~ 0.91).

Mais l'allure des courbes de débits jette un doute sur les valeurs de l'accommodation déterminées par la méthode cinétique pour les petits nombres de Knudsen. En conclusion nous avons plutôt tendance à considérer pour l'instant que, dans le régime de glissement, les valeurs de α obtenues par la méthode continue sont plus fiables : d'abord sur la base des commentaires développés aux chapitres (4) et (5) sur la modélisation cinétique BGK, ensuite parce que la technique même qui est utilisée pour déduire la valeur de α est plus fiable dans la méthode continue (calcul) que dans la méthode cinétique (évaluation visuelle de la coïncidence de deux profils).

DSMC

Les objectifs assignés à notre simulation de type Monte Carlo étaient d'abord de fournir des profils de vitesse et de contribuer ainsi à mieux cerner les limites du régime de glissement, ensuite de développer une modélisation alternative aux modèles cinétiques

Conclusions et perspectives

existant en régime transitionnel. Ces objectifs physiques ont été atteints.

Techniquement notre programme développé selon la conception objet (langage C++) pour les écoulements subsoniques en microfluidique est satisfaisant, et il s'avère performant pour la gestion des mouvements et la gestion des mouvements. L'efficacité de notre programme parallèle a été testé jusqu'à 32 processeurs. Elle s'est révélée globalement bonne, de plus un phénomène de super linéarité a été observé lorsque le nombre de processeurs est égal à 32. Enfin le concept, de N_R variable (nombre de particules réelles par particule de simulation) nous a permis d'obtenir des profils de vitesse en un temps raisonnable malgré les très faibles vitesses de l'écoulement.

Notre simulation, que nous avons appliquée en microcanal, mais qui peut s'étendre aussi sans difficulté, nous a permis d'apporter des informations significatives sur les paramètres de l'écoulement qui ne sont pas accessibles expérimentalement.

Les profils de vitesses déterminés sont en parfait accord avec la théorie cinétique pour $Kn_m \in [0.1 - 1]$: la comparaison est faite avec la résolution de EBL donnée par Ohwada *et al.* (1989) sous les hypothèses assez restrictives de ce dernier (*cf.* page 62). Il faut noter que cette vérification porte en outre sur des quantités adimensionnées et qu'elle ne valide pas forcément l'évolution des grandeurs suivant la variable longitudinale. De plus la comparaison avec l'approche BGK sous forme de test (*i.e.* avec des conditions strictement identiques) n'a pas été faite.

En ce qui concerne la comparaison de l'approche DSMC avec l'approche continue, on a vu que la concordance est très bonne pour $Kn_m \sim 0.1$, assez correcte pour $Kn_m \in 0.2$ (écart de 5% entre les modèles hors du voisinage immédiat de la paroi ($\sim \lambda/2$)). L'écart de 10% entre les deux approches pour $Kn_m \sim 0.3$ est encore acceptable si l'on considère que la modélisation DSMC elle même n'est pas exempte d'approximations. Ainsi nous avons pu estimer que la gamme $Kn_m \in [0 - 0.3]$ était raisonnable pour y limiter l'application des équations continues.

Par ailleurs notre approche DSMC a été utilisée aussi pour modéliser le débit sur l'ensemble des régimes. Le calcul a été fait *a priori* avec le coefficient d'accommodation $\alpha = 0.91$, tiré de l'étude expérimentale en régime de glissement. Ce calcul a été fait pour l'instant pour le rapport $\mathcal{P} = 3$. L'accord obtenu avec les points expérimentaux est satisfaisant. L'approche DSMC se révèle comme une alternative possible au traitement numérique des équations cinétiques. Pour conforter la validité de cette approche et éclaircir les différences qu'elle révèle par rapport aux autres traitements, il reste à préciser certaines de ses propriétés, notamment : sa sensibilité par rapport aux rapports de pression \mathcal{P} et le degré d'exactitude des principes de similitude utilisés en régime transitionnel.

Perspectives

A court terme, dans le prolongement direct du travail

1. Etayer d'avantage la validité et la précision du DSMC. Etendre son application aux tubes cylindriques

2. En régime de glissement : étudier l'influence de la courbure sur les termes de second ordre, utiliser l'analyse dimensionnelle pour formuler une expression de $\sigma_{2p}(\mathcal{R}, m, \mu \dots)$; corrélation avec le premier ordre et utilisation de nouveaux kernels de réflexion

A plus long terme et plus loin de ce travail

1. Etude systématique de la nature et de la rugosité des parois.
2. Etude d'écoulements déclenchés par gradient thermique (transpiration thermique)

Annexe A

Densité de probabilité et fonction de répartition

Nous souhaitons obtenir une variable aléatoire x comprise dans l'intervalle $[a - b]$ de densité de probabilité $f(x)$ ¹ connue, à partir d'une autre variable aléatoire ξ uniformément répartie entre 0 et 1. Pour que la correspondance entre ξ et x soit pertinente il faut satisfaire un certain nombre de conditions requises essentiellement par les axiomes du calcul des probabilités. Si ξ est une variable aléatoire uniformément répartie entre 0 et 1, cela signifie que la probabilité élémentaire pour que cette variable ait une valeur comprise entre ξ et $\xi + d\xi$ est

$$1 \cdot d\xi; \quad (\text{A.1})$$

tout comme la probabilité élémentaire pour que la variable aléatoire x ait une valeur comprise entre x_ξ et $x_\xi + dx$ sera

$$f(x_\xi)dx. \quad (\text{A.2})$$

La première condition pour que la valeur x_ξ de x corresponde au tirage de la valeur ξ est que l'on puisse écrire l'égalité de ces probabilités élémentaires :

$$f(x_\xi)d\xi = 1 \cdot d\xi, \quad (\text{A.3})$$

quelque soit la valeur ξ tirée et donc finalement quelque soit x . La relation peut donc se réécrire

$$d\xi = f(x)dx. \quad (\text{A.4})$$

Mais mathématiquement (A.4) est équivalente à

$$\int_0^\xi = \xi = \int_a^{x_\xi} f(x)dx \quad (\text{A.5})$$

1. Nous rappelons qu'une densité de probabilité est une fonction intégrable, positive, croissante, et qu'elle vérifie la relation de normalisation ($\int_a^b f(x)dx = 1$).

A. DENSITÉ DE PROBABILITÉ ET FONCTION DE RÉPARTITION

L'intégrale du second membre est appelée fonction de répartition ($F(x_\xi) = \int_a^{x_\xi} f(x)dx$). On note d'ailleurs que cette fonction de x_ξ ou plus généralement de x peut se tracer aisément à partir de la fonction $f(x)$ puisque elle représente en tout point x l'aire algébrique comprise entre $f(x)$ et l'axe des abscisses (figure A.1). Le sens physique de la relation (A.5) est évident : «la probabilité ξ de trouver la variable aléatoire uniformément réparti entre 0 et la valeur ξ , doit être égale à la probabilité de trouver la variable aléatoire x entre a et la valeur x_ξ de x qui lui correspond». Mais si (A.4) et (A.5) sont mathématiquement et physiquement équivalentes, c'est la relation intégrale (A.5) qui permet d'établir une correspondance pratique entre le nombre ξ aléatoire mais fixé et la valeur x_ξ de x qui lui correspond. En effet de (A.5) on tire

$$x_\xi = F^{-1}(\xi) \quad \forall x_\xi \in [0 - 1], \quad (\text{A.6})$$

$$(\text{A.7})$$

soit encore,

$$x = F^{-1}(\xi). \quad (\text{A.8})$$

Avant de donner une application concrète signalons que x est souvent une variable vectorielle que l'on détermine à l'aide de ses composantes x_1, x_2, x_3 ou plus généralement par l'intermédiaire de la donnée de plusieurs paramètres *e.g.* en coordonnées cylindriques (x_1, ρ, ϕ) . Dans ce cas la donnée (ou le tirage) de ξ est évidemment un tirage multiple, on tire un triplet de nombres aléatoires ξ_1, ξ_2, ξ_3 uniformément répartis entre 0 et 1. La probabilité ξ de tirer ces trois nombres aléatoires s'écrit :

$$\xi = \xi_1 \xi_2 \xi_3. \quad (\text{A.9})$$

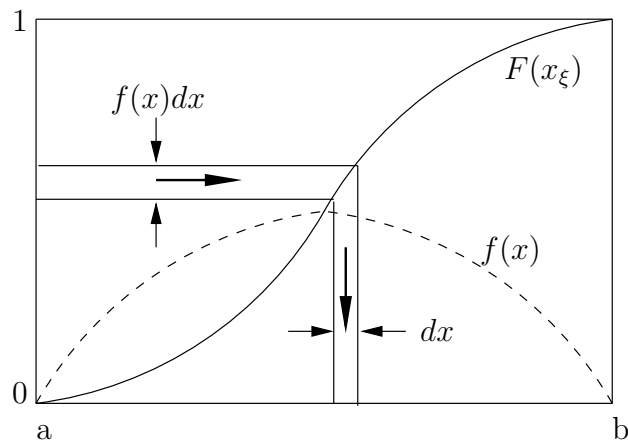


FIGURE A.1 – Densité de probabilité f et fonction de répartition F

Exemple : réflexion diffuse à la paroi.

Dans les problèmes de rebonds à la paroi décrits par une loi de Maxwell, les particules tests qui rebondissent de façon diffuses par opposition à celles qui rebondissent de façon spéculaires, doivent avoir comme vitesse, une variable aléatoire de densité de probabilité $f(v)$. En représentation cartésienne $f(v)$ s'exprime par :

$$f(v) = \frac{2}{C^4\pi} v_x e^{-v_x^2/C^2} e^{-v_y^2/C^2} e^{-v_z^2/C^2}, \quad (\text{A.10})$$

avec v_x positif. La fonction de répartition $F(v_\xi)$ peut se décomposer en un produit d'intégrales.

$$\xi = F(v_\xi) = \frac{2}{C^4\pi} \int_0^{V_X} \int_{-\infty}^{V_Y} \int_{-\infty}^{V_Z} v_x e^{-v_x^2/C^2} e^{-v_y^2/C^2} e^{-v_z^2/C^2} dv_x dv_y dv_z \quad (\text{A.11})$$

$$= \frac{2}{C^4\pi} \int_0^{V_X} v_x e^{-v_x^2/C^2} dv_x \int_{-\infty}^{V_Y} \int_{-\infty}^{V_Z} e^{-v_y^2/C^2} e^{-v_z^2/C^2} dv_y dv_z. \quad (\text{A.12})$$

Dans cette représentation on constate que l'intégrale en v_x s'intègre facilement mais l'intégrale double en v_y et v_z n'est pas calculable à l'aide d'une représentation analytique simple. Si l'on représente la densité de probabilité à l'aide des coordonnées cylindriques, l'expression de f devient :

$$f(v_x, v_r, \theta) = \frac{2}{C^4\pi} v_x e^{-v_x^2/C^2} e^{-v_r^2/C^2}. \quad (\text{A.13})$$

La probabilité élémentaire de trouver la molécule réfléchie dans un volume de vitesse $d\tau_v$ s'écrit :

$$f(v_x, v_r, \theta) d\tau_v. \quad (\text{A.14})$$

En coordonnées cylindriques l'expression de $d\tau_v$ peut s'obtenir à l'aide du jacobien relatif à la transformation,

$$\begin{aligned} v_x &= v_x \\ v_y &= v_r \sin \theta \\ v_z &= v_r \cos \theta \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

suivant la relation $d\tau_v = \frac{\partial(v_x, v_y, v_z)}{\partial(v_x, v_r, \theta)} dv_x dv_r d\theta$, avec

$$\frac{\partial(v_x, v_y, v_z)}{\partial(v_x, v_r, \theta)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial v_x}{\partial v_x} & \frac{\partial v_x}{\partial v_r} & \frac{\partial v_x}{\partial \theta} \\ \frac{\partial v_y}{\partial v_x} & \frac{\partial v_y}{\partial v_r} & \frac{\partial v_y}{\partial \theta} \\ \frac{\partial v_z}{\partial v_x} & \frac{\partial v_z}{\partial v_r} & \frac{\partial v_z}{\partial \theta} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sin \theta & -v_r \cos \theta \\ 0 & \cos \theta & v_r \sin \theta \end{vmatrix} = v_r, \quad (\text{A.16})$$

A. DENSITÉ DE PROBABILITÉ ET FONCTION DE RÉPARTITION

Dans la nouvelle représentation la probabilité élémentaire s'explique par :

$$f(v_x, v_r, \theta) d\tau_v = \frac{2}{C^4 \pi} v_x e^{-v_x^2/C^2} v_r e^{-v_r^2/C^2} dv_x dv_r d\theta. \quad (\text{A.17})$$

Il s'agit ici de déterminer les valeurs $V_X, V_R, \Phi/2\pi$ (de $v_x, v_r, \theta/2\pi$) qui rendent la probabilité de tirer un nombre aléatoire entre $[0 - \xi]$ égale à la probabilité d'avoir le vecteur vitesse v compris entre 0 et v_ξ , soit .

$$\xi = \int_0^{V_X} \frac{2}{C^2} v_x e^{-v_x^2/C^2} dv_x \int_0^{V_R} \frac{2}{C^2} v_r e^{-v_r^2/C^2} dv_r \int_0^{\Phi/2\pi} \frac{1}{2\pi} d\theta \quad (\text{A.18})$$

$$= \xi_1 \xi_2 \xi_3 \quad (\text{A.19})$$

On voit que la relation précédente est satisfaite par :

$$\xi_1 = \int_0^{V_X} \frac{2}{C^2} v_x e^{-v_x^2/C^2} dv_x = 1 - e^{-V_X^2/C^2} \quad (\text{A.20})$$

$$\xi_2 = \int_0^{V_R} \frac{2}{C^2} v_r e^{-v_r^2/C^2} dv_r = 1 - e^{-V_R^2/C^2}$$

$$\xi_3 = \int_0^{\Phi/2\pi} \frac{1}{2\pi} d\theta = \theta/2\pi$$

D'où l'on tire aisément :

$$\begin{aligned} V_X &= C \sqrt{-\ln(1 - \xi_1)} \\ V_R &= C \sqrt{-\ln(1 - \xi_2)} \\ \Phi &= 2\pi \xi_3 \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

En posant suivant l'usage :

$$\begin{aligned} \text{Rand0} &= 1 - \xi_1 \\ \text{Rand1} &= 1 - \xi_2 \\ \text{Rand2} &= \xi_3 \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

En tenant compte de cette dernière écriture et de la relation (A.15), on obtient enfin :

$$\begin{aligned} V_X &= C \sqrt{-\ln(\text{Rand0})} \\ V_Y &= C \sqrt{-\ln(\text{Rand1})} \sin(2\pi \text{Rand2}) \\ V_Z &= C \sqrt{-\ln(\text{Rand1})} \cos(2\pi \text{Rand2}) \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Annexe B

Publications

Cette annexe regroupe l'ensemble des publications scientifiques publiées dans des revues internationales :

1. Ewart, T., Perrier, P., Graur, I. & Méolans, J.G. (2006). Mass flow rate measurements in gas micro flows. *Experiments in Fluids*, **41**, 487-498. (page [120](#))
2. Ewart, T., Perrier, P., Graur, I. & Méolans, J.G. (2007). Tangential momentum accommodation in microtube. *Micro and Nanofluidics*, **3**(6) :689-695,2007 (page [132](#))
3. Ewart, T., Perrier, P., Graur, I. & Méolans, J.G. (2007). Mass flow rate measurements in microchannel, from hydrodynamic to near free molecular regimes. *J. Fluid Mech.*, **584**, 337-356,2007 (page [139](#))

Timothée Ewart · Pierre Perrier · Irina Graur
J. Gilbert Méolans

Mass flow rate measurements in gas micro flows

Received: 10 June 2005 / Revised: 1 June 2006 / Accepted: 2 June 2006
© Springer-Verlag 2006

Abstract The main objective of this experimental investigation on the gas flow slip regime is to measure the mass flow rate in isothermal steady flows through cylindrical micro tubes. Two technical procedures devoted to mass flow rate measurements are compared, and the measured values are also compared with the results yielded by different approximated analytical solutions of the gas dynamics continuum equations. Satisfactory results are obtained and the way is clearly opened to measuring mass flow rates for higher Knudsen numbers, over all the micro flow transitional regime.

1 Introduction

Since the early 1980s, mass flow rates in microchannels have mostly been measured using a liquid drop method (Colin et al. 2004; Harley et al. 1995; Lalonde 2001; Maurer et al. 2003; Pong et al. 1994; Zohar et al. 2002). So far, in order to determine volumes variations and mass flow rates, the drop movement has been either observed through a low power microscope (Harley et al. 1995) or determined visually as a meniscus of water travelling along the marked scale of a syringe (Zohar et al. 2002) or detected by means of optoelectronic sensors (Colin et al. 2004). Other authors (Arkilic et al. 1997; Arkilic et al. 2001) have used a different method involving a sensitive dual-tank accumulation technique based on the measurements of the pressure differences between an accumulation reservoir and a reference tank.

Another approach used by some authors involves the utilization of flowmeters (Yao et al. 2004) or high precision flow sensors (Jang and Wereley 2004) to

measure the mass flow rate. But this kind of measurement is restricted to relatively high mass flow rates about 10^{-8} kg/s.

The main aim of the present study focusing on the gas flow regime is the validation of a mass flow rate measurement method based on direct pressure change measurements. Two methods are presented:

1. The liquid drop method already used and tested in previous years, developed here using new equipment.
2. A new method (new as far as the measurement range is concerned) based on constant volume pressure measurements, using up-to-date Inficon™ pressure gauges with a resolution of 1.9, 0.19 and 0.019 Pa.

Let us point out that the experimental methods mentioned at the beginning of the introduction generally concern experiments carried out in channels with rectangular (or trapezoidal) cross-sections, while the present measurements were carried out in microtubes. Experiments in this type of geometry are rare (Porodnov et al. 1974; Dong 1956; Tison 1993) and they were obtained in tubes of relatively large diameter (3.64 cm in Dong 1956), or using capillary packets of 10–640 capillaries (1974), which makes it difficult to control the diameter of the capillaries.

Then the different features and the respective potentialities of the two experimental techniques are compared. Their respective results are analyzed and compared with theoretical results derived from continuum approaches taking into account the rarefaction effects present in microflows.

Although the NS equations are derived from a first order kinetic solution, many authors (Karniadakis and Beskok 2002; Cercignani 1964; Colin et al. 2004; Deissler 1964; Hadjiconstantinou 2003) have suggested to use in this framework the velocity slip conditions of second order according to the Knudsen number, to better take into account the rarefied effects for the moderately rarefied gas flows. The implementation of

T. Ewart (✉) · P. Perrier · I. Graur · J. Gilbert Méolans
Département de Mécanique Energétique - UMR CNRS 6595,
Université de Provence - Ecole Polytechnique Universitaire de
Marseille, 5, rue Enrico Fermi, 13453 Marseille cedex 13, France
E-mail: timothee.ewart@polytech.univ-mrs.fr

these conditions leads to an additional term in the mass flow rate expression proportional to the second order in Knudsen number.

The presence of the high order terms in the mass flow expression has also been highlighted by other authors (Lang and Loyalka 1984). By applying the BGK model in the Boltzmann equation for the cylindrical Poiseuille flow and in the case of diffuse scattering, a asymptotic formula for the flow rate containing the terms of second and also third order in Knudsen number was obtained (Lang and Loyalka 1984). In addition, a highly circumstantial review of a number of theoretical approaches may be found in Sharipov and Seleznev (1998).

The analysis of the present mass flow rate measurements reveals the existence of so-called “second order effects” for averaged Knudsen numbers larger than 0.1, as it was found in Maurer et al. (2003) and Colin et al. (2004). Furthermore, the velocity slip coefficients for the velocity slip condition of second order and the accommodation coefficient are deduced from experiments using various continuum approaches.

2 Experiments

2.1 Description of the methodology and experimental set-up

Each of the experimental methods used in the present work to measure the mass flow rate through a micro tube involves the use of two constant volume tanks and so may be denoted “constant-volume technique”. Both methods require very large tank volumes, much larger than the volumes of the micro tube and syringe in which the gas flows during the experiments (Fig. 1). Large tank sizes guarantee micro flow parameters independent of the time: although detectible (through their effects), the mass variations occurring in the tanks during the experiments do not call into question the stationary assumption. Thus, we have to fix a range for the maximal suitable pressure variations in the second tank, according to the inlet and outlet conditions. The experimental set up shown in Fig. 1 takes into account these constraints. The gas flows through a fused silica micro tube fixed between two tanks in which the pressures remain very close to constant values P_{in} and P_{out} , respectively. A pressure regulator and a valve A (see Fig. 1) are used to impose the pressure in the first tank. The pressure in the second tank is adjusted by means of another pressure regulator and three valves B, C and D (see Fig. 1), to ensure better tightness. In this tank the pressure variation due to the gas flow through the micro tubes is fixed at $\pm 1\%$ of the tank pressure averaged over the duration of the experiment (for the experiment based on the pressure measurements). As a consequence, the relative pressure variation in the first tank remains close to $\pm 0.2\%$. This variation range

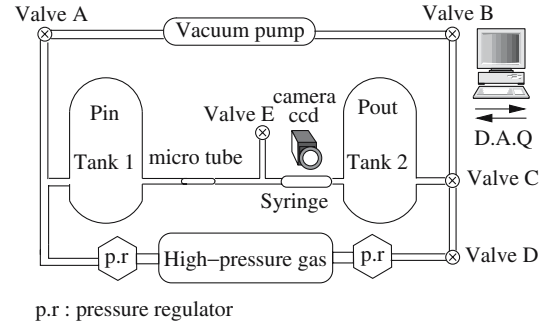


Fig. 1 Schematic of mass flow experiment

Table 1 Detector study range, each detector is used in its appropriate pressure study range

	Detector A	Detector B	Detector C
Pressure limit max (Pa)	133322.0	13332.2	1333.22
Pressure limit min (Pa)	13332.0	1333.2	133.32

means that the required experiment duration τ will vary from about 5 min for the highest mass flow rate measured (10^{-9} kg/s) to about 50 min for the lowest (10^{-13} kg/s).

The pressure measurements were carried out using simultaneously two detectors chosen according to the pressure range (see Table 1). The first one (Inlet Detector) was located in the first tank, upstream from the micro tube while the second (Outlet Detector) was located downstream from the micro tube. The errors in pressure measurements in each tank depend on the characteristics of the pressure detectors, given in Table 2. Thus, in the pressure range observed during the experiments, the errors on the measurement of the outlet pressures were estimated smaller than 0.5%.

Moreover to obtain a significant and accurate pressure variation we also fixed a lower limit for the data acquisition, equal to 60 times the resolution. Thus the statistical processing involves a correct discrete distribution of a sufficient number of points.

It is also of great importance to measure the diameters of the tubes with a good accuracy because the analytical expression of the mass flow rate is propor-

Table 2 Technical data for the gas detectors

	Detectors (A, B and C)
Full scale FS (Pa)	133,322.0 (A) 13,332.2 (B) 1,333.22 (C)
Accuracy	0.20% of reading
Temperature effect on zero	0.0050% FS/K
Temperature effect on span	0.01% of reading/K
Resolution	0.0015% FS

The three detectors have similar characteristics, but their full scales are different

tional to the power four of the diameter. The surfaces of the inlet and outlet sections were scanned in environmental scanning mode (ESEM) with an electron microscope and the following estimation of the diameters can be obtained:

$$D = 25.2 \pm 0.35 \mu\text{m}. \quad (1)$$

The measurement of the tube length gives $L_{\text{tube}} = 5.30$ cm. Since the length of the tube is essentially greater than its diameter the end effects can be neglected. Moreover, the Reynolds numbers calculated for the considered flow conditions vary in the range $1.8 \times 10^{-3} - 2.5$, which confirms once again that the entrance and exit effects can be neglected.

For all the connections needed in the gas circuit, we used a standard vacuum material (Swagelock™ technology) to achieve the best tightness possible. The control of the tightness is all the more important as the pressures and mass flow rates to investigate are low. Leak estimations were provided by various tests. The leakage check was performed by pumping out the system (the pressure was fixed at the same low value in both tanks), and monitoring the pressure rise in the second (downstream) tank for several hours. The first step of the measurements was performed using detectors A and B. In that case, the lower pressure measured in the outlet tank was $\sim 1,032$ Pa. The leakage check was performed in these conditions. When the mean pressure was equal to 361.8 Pa in both tanks and for a long experiment time (2 h), the sensor did not detect any fluctuation of the signal: thus the pressure increase due to the leaks was lower than the sensor resolution (0.19 Pa), which implies a leak rate smaller than 2.08×10^{-14} kg/s. For the mass flow range considered ($2 \times 10^{-12} - 2 \times 10^{-10}$ kg/s) these results represent a satisfactory leak estimation: for the lowest mass flow rate measured, the error induced by the leaks is certainly much smaller than 1%.

Another experimental leakage check was carried out by means of helium detection (with a portable leak detector): the effect of the leaks on the mass flow rate was thus controlled as being smaller than 10^{-17} kg/s. Therefore this effect was not taken into account when estimating the experimental errors.

The experiments were performed within a narrow temperature range around 296.5 K, excluding any heat source in the environment. During each experiment, the temperature was not maintained but controlled to be sufficiently constant to justify the isothermal assumption. Thus, during each experiment the maximal instantaneous temperature deviation from its initial value was registered smaller than 0.5 K, using the temperature detector with 0.13 K accuracy. In Sect. 2.2, devoted to the measurement that was the most sensitive to the perturbing temperature variations, it will be shown that the non-isothermal effects are negligible.

Utilizing the apparatus described in Fig. 1 and taking into account the previous methodological considerations, we used two different technical approaches for

the measurements of mass flow rates through micro tubes: one consisting in registering the motion of a liquid drop in a calibrated pipette installed downstream from the micro tube (see Fig. 1), the other based on direct pressure rise measurements in the outlet tank. In the next paragraph this latter method is developed first for a clearer presentation.

2.2 Mass flow rate measurement 1 (pressure method)

2.2.1 Analysis of the non-isothermal effects

The first technique used to measure the mass flow rate consists in determining in the outlet tank a small pressure change due to the mass flowing from the micro tube. The disturbing temperature variation in the outlet tank could directly perturb the significance of the measurement. To make this clear, let us write for this tank the law of perfect gases under the form:

$$P_{\text{out}}V = mRT, \quad (2)$$

where V represents the outlet tank volume which remains constant during the experiment, $V = 65.71 \pm 1.5$ cm³, and R is the specific gas constant. P_{out} , T and m are, respectively, the pressure, temperature and mass of gas in the outlet tank, at any time t of the experiment time length τ . Let us define the variation dq of any thermodynamic parameter q , occurring in the tank during the experiment time length (whatever the reason for these variations). According to the previous section comments, these relative variations remain small, compared to 1. Therefore, they are obtained from Eq. 2, as verifying:

$$\frac{dP_{\text{out}}}{P_{\text{out}}} = \frac{dm}{m} + \frac{dT}{T}. \quad (3)$$

Dividing the two terms of Eq. 3 by the experimental time length τ and using Eq. 2 we obtain:

$$\frac{dm}{\tau} = \frac{V}{RT} \frac{dP_{\text{out}}}{\tau} (1 - \varepsilon), \quad \varepsilon = \frac{dT/T}{dP_{\text{out}}/P_{\text{out}}}. \quad (4)$$

If ε is very small compared to 1, disregarding the technical uncertainties, dm/τ may be identified to the mass flow rate Q_m flowing from the micro tube, and dP_{out} (termed below δP_{out}) will allow direct measurement of Q_m . As pointed out in the previous paragraph, the maximal instantaneous temperature departure (from its initial value) registered during the experiments was smaller than half a degree. Such a departure certainly overestimates the probable temperature variation at any time. Therefore, from the various points (n is the number of points) acquired during the experimental time τ , we calculated the mean temperature value \bar{T} and its corresponding standard deviation s , which appears here as a pertinent

evaluation of the probable temperature variation. The sample standard deviation is defined by

$$s = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (T_i - \bar{T})^2}, \quad (5)$$

where T_i is the registered data for the temperature. In the most unfavorable case this estimation leads to a relative variation $\delta T/T = s/T$ around the mean temperature equal to 2×10^{-4} , against 1×10^{-2} for the relative variation $\delta P_{\text{out}}/P_{\text{out}}$: ε is clearly smaller than 2×10^{-2} . Thus the measurement based on the pressure rise may be considered as the measurement of an isothermal mass flow rate equal to

$$Q_m = \frac{V}{RT} \frac{\delta P_{\text{out}}}{\tau}, \quad (6)$$

affected by a specific relative error equal to $\pm 2 \times 10^{-2}$ due to the temperature variation.

It is necessary to make an additional remark. When protecting accurately the experiment environment from radiant or conductive processes, the thermal probe exchanges were exclusively convective and so characterized, in our conditions, by rise times greater than 1 min (i.e. frequencies smaller than 0.0166 Hz). Thus, filtering the thermal probe signal for cutting the frequencies higher than 0.03 Hz (i.e. disregarding the rise times smaller than 33 s) cannot alter its real thermal content: so doing, $\delta T/T$ obtained from Eq. 5 was divided by a factor 3. Therefore, for some experiments carried back in such conditions, the allowed $\delta P_{\text{out}}/P_{\text{out}}$ (as characterizing an isothermal steady process) could be also reduced in the same ratio.

2.2.2 Pressure rise measurements

Since the effects of the temperature variation are negligible, we may consider the flow through the micro tube as a stationary flow between two tanks maintained at constant pressures P_{in} and P_{out} , respectively. Moreover, the isothermal mass flow rate may be expressed in the form (6). To determine this mass flow rate we will use the registered data for the pressure P_i at the time instants t_i . The flow stationary conditions physically justify the pressure rise interpolation by means of a linear fitting function of time

$$P_f(t) = at + b, \quad a = \frac{\delta P_{\text{out}}}{\tau}. \quad (7)$$

Using the least-square method we handled a number of points n ranging between 1,300 and 3,800. The calculation of the coefficients a is characterized by a very convenient value of the usual determination coefficient r^2 , greater than 0.9993. Under the reasonable assumption of negligible errors in determining the fixed time values t_i chosen, the calculation of the standard deviation for the coefficient a yields

$$\Delta a = \left[\left(n \sum_{i=1}^n (P_i - P_f(t_i))^2 \right) / \left((n-2) \left(n \sum_{i=1}^n t_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n t_i \right)^2 \right) \right) \right]^{1/2}. \quad (8)$$

According to the previous remarks, formula (8) represents a correct estimation of the error on coefficient a (i.e. also on $\delta P_{\text{out}}/\tau$) and yields a relative error smaller than $\pm 0.1\%$. Thus, the usual evaluation of the measurement errors results from relations 6, 7 and 8 as

$$\frac{\Delta Q_m}{Q_m} = \frac{\Delta V}{V} + \frac{\Delta T}{T} + \frac{\Delta a}{a}, \quad (9)$$

where $\Delta T/T$ is negligible, but where the non-isothermal effects previously evaluated ($\pm 2\%$) must be added on $\Delta Q_m/Q_m$. $\Delta V/V$ is the uncertainty of the volume measure ($\pm 2\%$) and $\Delta a/a$ the error on coefficient a ($\pm 0.5\%$). Moreover, since the leaks were estimated as totally negligible (see Sect. 2.1), we did not integrate them in the total uncertainty on the mass flow rate. Therefore, we obtain a full uncertainty on $\Delta Q_m/Q_m$ smaller than $\pm 4.5\%$.

2.3 Mass flow rate measurement 2 (drop method)

In the standard drop method, the mass flow rate is measured by determining the speed of a liquid drop moving in a calibrated tube, using a low power microscope (Harley et al. 1995) or opto electronic sensors (Colin et al. 2004) or simply visually (Zohar et al. 2002). In the present work an oil drop was chosen because of its low saturation vapor (1.33×10^{-3} Pa) to avoid a vaporizing effect on the moving surface of the drop. The drop was injected in the calibrated tube through valve E (see Fig. 1) and its movement was recorded by means of a digital camera $1,290 \times 980$ pixels. Thus the position of the drop was registered as a function of time. Figure 2a shows the real drop position in the calibrated tube and Fig. 2b presents a superposition of a large number of images taken with a camera. The straight line represents the drop position (in pixels) as a function of time and the slope of this line corresponds to the drop velocity.

Let us denote $X(t)$ the spatial coordinate giving the drop surface position at time t . δX is the length covered by the moving surface during the experiment time length τ , δV is the corresponding volume in the same time, V_s is the syringe volume and L the syringe length. Using the stationary assumption the volume flow rate Q_v reads

$$Q_v = \frac{\delta V}{\tau} = \frac{V_s \delta X}{\tau L}. \quad (10)$$

Moreover, let us denote N_X and N_L the respective measures (in pixels) of the images X and L taken by the camera:

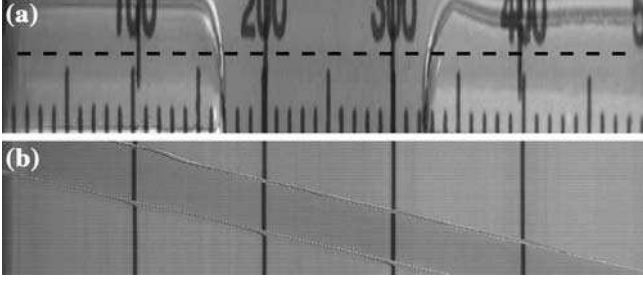


Fig. 2 **a** Shows a particular picture from the recorded movie from which we extracted a pixel line (dotted line). On **b**, we superimposed the pixel line from **a** for every picture in the movie. Finally, we can distinguish the back and the front oil drop slopes; we used one of them to get the drop numerical speed $v = \delta N_X / \tau$

$$\frac{\delta X}{L} = \frac{\delta N_X}{N_L}. \quad (11)$$

Thus we obtain from Eq. 10

$$Q_v = \frac{V_s}{N_L} \frac{\delta N_X}{\tau}, \quad Q_m = \frac{Q_v P_{\text{out}}}{RT}, \quad (12)$$

where the mass flow rate is deduced from Q_v , considering the flow downstream from the drop, in a large syringe, as incompressible (a Poiseuille calculation in the syringe gives a negligible pressure variation due to the very low velocity). To calculate $\delta N_X / \tau$ we again used a least square method based on the n registered values of N_X in the experiment duration τ . Again, the flow stationary conditions justify to interpolate the N_X variation by fitting the δN_X values with a linear function $N_{X_f}(t)$:

$$N_{X_f}(t) = \alpha t + \beta, \quad \alpha = \frac{\delta N_X}{\tau}. \quad (13)$$

We employed a number n of registered points close to 100, and the calculation of α was characterized by a determination coefficient $r^2 > 0.997$ (except for one point). The calculation of the standard deviation $\Delta \alpha$, similar to that given in relation (8), leads to a relative error on α (i.e. also on $\delta N_X / \tau$) smaller than 10^{-3} . The total relative uncertainty on Q_m may be calculated from Eqs. 12 and 13 according to

$$\frac{\Delta Q_m}{Q_m} = \frac{\Delta V_s}{V_s} + \frac{\Delta \alpha}{\alpha} + \frac{\Delta N_L}{N_L} + \frac{\Delta P_{\text{out}}}{P_{\text{out}}} + \frac{\Delta T}{T}, \quad (14)$$

where $\Delta T / T$ is here of negligible effect (as previously seen in Sect. 2.2 $\Delta T / T \leq 2 \times 10^{-4}$). Moreover $V_s = 500 \pm 5 \mu\text{l}$ and $N_L = 1,123 \pm 15$ pixels. $\Delta P_{\text{out}} / P_{\text{out}}$ is here greater than what was claimed in Sect. 2.1: due to the pressure variation through the drop, it is finally found 1.5%. So, from Eq. 14, considering the series of measurements investigated $\Delta Q_m / Q_m$ is close to $\pm 4.2\%$.

2.4 Background theory

For many years, pressure-driven slip flow within ducts or channels has received considerable attention. The

many formulations of the analytical and semi-analytical solutions have been presented (Karniadakis and Beskok 2002). The analytical models derived from the Navier–Stokes equations or from other continuum equation systems require the use of the velocity slip boundary conditions. Several authors have recently proposed to use in this framework the velocity slip conditions of second-order according to the Knudsen number to better take into account the rarefied effects for the moderately rarefied gas flows. It should be noticed that the Navier–Stokes equations result from the first order Chapman–Enskog expansion and do not logically require the second order of boundary conditions, as for example the Burnett or QGD equations do. But, according to Cercignani (1964), if a certain degree of symmetry is present in the flow, the Burnett terms in the momentum equation are equal to zero far from the wall, so that the second order slip can sometimes be meaningfully associated with the Navier–Stokes momentum equation.

The form of the second order velocity slip boundary condition when the streamwise velocity depends only on the direction normal to the wall and for a isothermal flow reads (Cercignani 1964):

$$u_s = \pm \sigma_p \frac{\mu}{P} \sqrt{2RT} \left(\frac{\partial u}{\partial r} \right)_w - \sigma_{2p} \left(\frac{\mu}{P} \sqrt{2RT} \right)^2 \times \left(\frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right)_w, \quad (15)$$

where σ_p and σ_{2p} are the first and second order velocity slip coefficients, which depend on the reflection law. Therefore, the reflection process at the wall exerts a direct influence here, while the intermolecular forces act only through the viscosity coefficient, whatever the interaction model used in the gas. This appears in the expression of the mass flow rate and also in the pressure and velocity profiles (Méolans et al. 2004). It should be noted that Eq. 15 is written in terms of measurable quantities; for the application however, it is very convenient to characterize the rarefied flow as depending on the mean free path λ of the molecules or on the Knudsen number. The molecular mean free path is defined by the relation

$$\lambda = k_\lambda \frac{\mu}{P} \sqrt{2RT}, \quad (16)$$

where coefficient k_λ depends on the molecular interaction model. Very often, $k_\lambda = \sqrt{\pi}/2$ (i.e. a value close to that obtained from the hard sphere model (HS) Chapman and Cowling 1970) is retained. Another possibility consists in using the expression deduced by Bird (1994) for the variable hard sphere model (VHS), more general than the HS model. According to this model, coefficient k_λ is equal to $\frac{(7-2\omega)(5-2\omega)}{15\sqrt{\pi}}$, where ω , the viscosity index, depends on the type of gases (see Table 3). Within the VHS model the viscosity thermal dependence reads: $\mu = \mu_{\text{ref}} \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}} \right)^\omega$. In this work, we used the VHS model. Using

Table 3 Physical constants of N_2 under standard conditions

Parameter	N_2
Viscosity (μ_{ref}) (Ns/m ²) $\times 10^{-5}$	1.656
Specific gas constant (\mathcal{R}) (J/kg K)	297
Viscosity index ω	0.74
k_λ (VHS model)	0.731

expression (16) for the mean free path, the velocity slip condition (15) may be rewritten as

$$u_s = \pm A_1 \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial r} \right)_w - A_2 \lambda^2 \left(\frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right)_w, \quad (17)$$

where coefficients A_1 and A_2 may be presented in the form:

$$A_1 = \frac{\sigma_p}{k_\lambda}, \quad A_2 = \frac{\sigma_{2p}}{k_\lambda^2}. \quad (18)$$

Unlike the velocity slip coefficients, constants A_1 and A_2 depend on the interaction model used in the gas.

Many different theoretical values of coefficients A_1 and A_2 have been proposed in the literature (see review articles Barber and Emerson 2005; Karniadakis and Beskok 2002; Bird 1994; Chapman and Cowling 1970; Hadjiconstantinou 2003; Lang and Loyalka 1984; Sharipov and Seleznev 1998). It can be seen that no agreement has yet been reached on the correct value, not only of the second but also of the first order coefficient. We will discuss below the various theoretical values of the first and second order velocity slip coefficients and compare them with the measured values (in Sect. 3.3).

An analytical approach has recently been proposed (Méolans et al. 2004) for isothermal two dimensional gas flows in micro channels. This approach is based on a conservation equation system [quasi gasdynamic equations (QGD)], using modified closure relations and new expressions of the various fluxes and involving Kn second order terms (Elizarova and Sheretov 2001). In the present work an analytical expression of the streamwise mass flow rate as a function of a pressure and its gradient is obtained under the same assumptions but for a cylindrical geometry:

$$J = -\frac{\pi}{8\mu\mathcal{R}T} \times \left(\frac{D}{2} \right)^4 P \frac{dP}{dz} \left(1 + 8A_1 k_\lambda \frac{\mu \sqrt{2\mathcal{R}T}}{P} + 32 \left(A_2 k_\lambda^2 + \frac{a}{2} \right) \times \left(\frac{\mu \sqrt{2\mathcal{R}T}}{P} \right)^2 \right). \quad (19)$$

It should be noted, that the previous expression is obtained using the second order slip boundary condition (17). The implementation of the second order boundary condition seems to be more meaningful for the QGD model than for the NS model, because the QGD equations basically involve diffusive terms proportional to the second order of the Knudsen number.

It is possible to consider Eq. 19 as a generalized expression derived using one of the two approaches: either the Navier–Stokes or the QGD models both with the second order boundary condition (17). In expression (19) coefficient $a = 0$ corresponds to the NS equations and $a = 1$ to the QGD approach.

Integrating the mass flow rate (Eq. 19) in the streamwise direction and then using the mass flow conservation along the channel, we obtain a mass flow rate expression depending only on the inlet and outlet pressures ($\mathcal{P} = P_{\text{in}}/P_{\text{out}}$), the temperature and the geometrical conditions:

$$Q_m^T = \frac{\pi D^2 \mu k_\lambda^2}{256 L K n_{\text{out}}^2} (\mathcal{P}^2 - 1 + 16 A_1 K n_{\text{out}} (\mathcal{P} - 1) + 64 \left(A_2 + \frac{a}{2 k_\lambda^2} \right) \ln \mathcal{P} K n_{\text{out}}^2). \quad (20)$$

It should be noted that the mass flow rate expression given by the QGD model in comparison with NS equations contains one additional term proportional to the second order Knudsen number. This term is phenomenologically different from the corresponding second order term appearing when using the second order velocity boundary condition. In this case, the second order effects are focused on the wall through the slip coefficients. On the contrary, in the additional QGD second order term, the second order effects result from diffusive and collisional effects located in all the flow-field.

Furthermore a non-dimensional mass flow rate may be deduced from relation (20), where a mean Knudsen number denoted Kn_m appears, based on the mean pressure $P_m = 0.5(P_{\text{in}} + P_{\text{out}})$:

$$S = 1 + 8 A_1 K n_m + 16 \left(A_2 + \frac{a}{2 k_\lambda^2} \right) \frac{\mathcal{P} + 1}{\mathcal{P} - 1} \ln \mathcal{P} K n_m^2 = Q_m^T / \frac{\pi \Delta P P_m}{8 \mu \mathcal{R} T L} \left(\frac{D}{2} \right)^4, \quad (21)$$

where $\Delta P = P_{\text{in}} - P_{\text{out}}$. Expression (21) may be rewritten in the more compact form:

$$S = 1 + A^{\text{theor}} K n_m + B^{\text{theor}} K n_m^2. \quad (22)$$

The analytical expressions of the mass flow rate (Eqs. 20, 21, 22) will be used for calculations and comparison with the appropriate measured values.

3 Results and discussion

3.1 First comparison of the results

Each experiment was carried out, with a constant pressure ratio \mathcal{P} between the tanks, within the narrow range 4.47–5.02, centered around $\mathcal{P} = 4.75$. The experimental conditions are summarized in Table 4. Nitrogen was used as the working gas.

Table 4 Experimental pressure range

Quantity	Min.	Max.
Inlet pressure (Pa)	1,218.8	1,2107
Outlet pressure (Pa)	245.02	2,470.9
Outlet Knudsen number Kn_{out}	0.0086	0.871
Average Knudsen number Kn_m	0.0029	0.289

The two methods implemented in the present work were already known, but they were transformed in order to be utilized in new conditions, especially within new pressure ranges. The drop method had previously been applied for outlet pressures higher than 4,800 Pa and so for mass flow rates higher than those considered here except (Lalonde 2001), and similarly the pressure rise detection had not been employed with such sensitive gauges.

Figure 3 presents the comparison of the mass flow rate measured with the two different techniques for the same outlet Knudsen number range with the analytical solution (20) calculated as a function of the outlet Knudsen number for a fixed pressure ratio $\mathcal{P} = 4.7$. The relative experimental error bars vanish when using the logarithmic scale. Thus from Fig. 3 we can conclude to a global agreement between the two experimental methods and moreover to their reasonable agreement with the analytical QGD approach.

Figure 4 shows the experimental mass flow rate measured with the two techniques, where the range of the pressure method is extended up to an average Knudsen number $Kn_m \sim 0.3$. The experimental errors shown for the two methods are both of the same order, as seen above ($\pm 4.2\%$ for the drop method

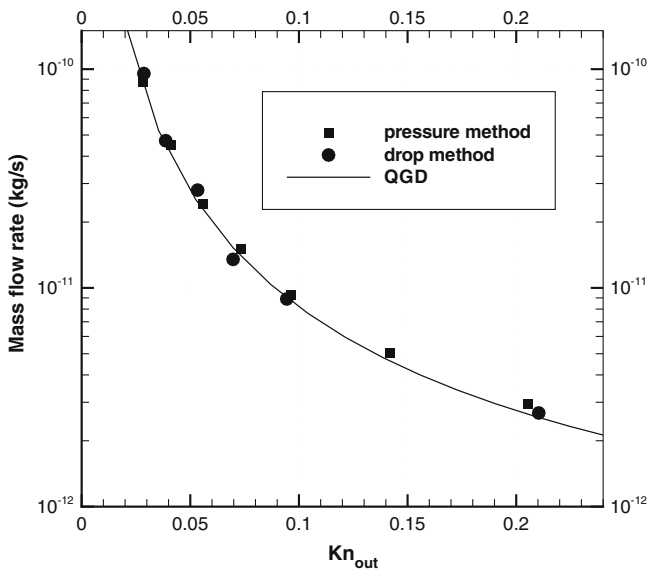


Fig. 3 The *squares* and *circles* are the experimental measurements. The *solid line* represents the analytical mass flow rate calculated according to Eq. 20 with a fixed pressure ratio $\mathcal{P} = 4.7$

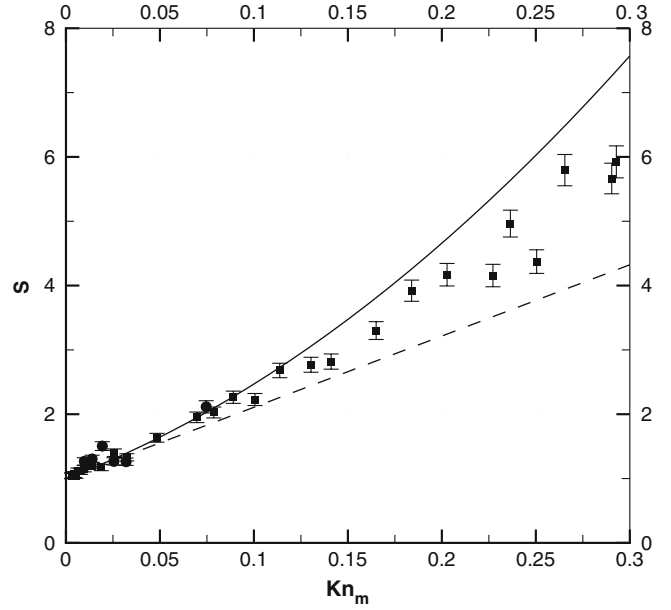


Fig. 4 The *circles* and *squares* are the experimental measurements. The *solid line* represents the analytical QGD solution calculated according to Eq. 21 ($A_2 = 0$, $a = 1$) with a fixed pressure ratio $\mathcal{P} = 4.75$. The *dashed line* is the analytical NS solution (Eq. 21) with $A_2 = 0$, $a = 0$

and $\pm 4.5\%$ for the pressure method). The experimental results are presented in a non-dimensional form according to the right-hand side of relation (21). Two analytical solutions are also plotted: the analytical solution of NS equations with the first order velocity slip condition, this case corresponds to $A_2 = 0$, $a = 0$ in Eq. 21, and the analytical solution of the QGD equations also with the first order velocity slip condition ($A_2 = 0$, $a = 1$ in Eq. 21). These two analytical solutions are calculated with the fixed pressure ratio $\mathcal{P} = 4.75$. Figure 4 shows the presence of the second order effects appearing for a mean Knudsen number greater than 0.1. The implementation of the NS equations with the first order boundary condition underestimates the measured mass flow rate while the QGD equations, also with the first order condition, overestimate the measurement. This result prompts two comments:

- the various theoretical models present differences which can exceed the second order effects;
- a second order seems really present anyway and should be further analyzed.

3.2 A promising method of measurement

Now, the two methods should be compared with regard to the difficulties encountered during their implementation, and also regarding their possible improvement. The drop method presents the advantage of allowing direct

Table 5 Experimental coefficients A_i^{exp} and B_i^{exp} obtained from the polynomial fitting of the first ($i = 1$) or the second ($i = 2$) degree, using the definitions of the viscosity coefficient μ and of the mean free path λ from the VHS model

Kn_m range	A_1^{exp}	A_2^{exp}	B_2^{exp}	$\sum e_i^2$	r^2
0.003–0.291	–	11.92 ± 0.89	15.61 ± 3.75	1.1556	0.9857
	15.48 ± 0.29	–	–	1.7634	0.9782
0.003–0.202	–	11.84 ± 0.77	17.38 ± 4.98	0.2913	0.9869
	14.42 ± 0.28	–	–	0.7238	0.9810
0.003–0.101	–	13.94 ± 1.54	-7.45 ± 19.35	0.1765	0.9526
	13.37 ± 0.44	–	–	0.1777	0.9523

rough visual control of the flow stationarity. But its implementation brings up various problems:

- it is difficult to introduce the oil drop in the calibrated tube without causing a small pressure jump in the second tank;
- several drops may form in the calibrated tube, perturbing the velocity and thus the pressure measurements;
- one drop may “explode” in the calibrated tube, causing a pressure jump which distorts the measurements. It is to note that the measurement of this jump gives the value 9.59 Pa, which corresponds to the pressure difference upstream-downstream the drop;
- it is difficult to precisely estimate the drop-gas interface position in the syringe and to be sure to follow the same point of this interface throughout the experiment.

The pressure method is free of this kind of problems and is very easy to use because all the data are recorded and exploited automatically. Moreover the pressure measurements could be improved: first it is possible to reduce the size of the tanks without calling into question the stationary assumption, and thus it would take less time to run the experiments. It is also possible to extend the Kn_m range investigated by diminishing \mathcal{P} (down to about 3) with a reasonable experiment time length (shorter than 2 h). Moreover replacing nitrogen with helium as the working gas and considering the respective physical properties of these gases, measurements can be carried out for Kn_m up to 3.5, which corresponds to mass flow rates of about 3×10^{-14} kg/s. The potentialities of the second detector theoretically allow P_{out} to be decreased even more, but this is presently limited by a perturbing thermal creep effect induced by the pressure gauges heating (Poulter et al. 1983; Jitschin and Röhl 1987), which makes a systematic investigation difficult. Nevertheless a perspective is thus opened to obtain experimental mass flow rate data for even higher Knudsen numbers.

Finally, it should be noticed that the difficulties previously pointed out in Arkilic et al. (1997) about the single constant-volume tank disappear under the present experimental conditions: the pressure gauges are sufficiently sensitive and P_{out} sufficiently low to obtain correct isothermal mass flow rate measures, for reasonable

time lengths and without significant perturbing effects of possible temperature variations.

3.3 First and second order effects

In addition, the experimental dimensionless mass flow rate data were fitted with a first and second order polynomial forms of Kn_m :

$$S_f^{\text{exp}} = 1 + A_i^{\text{exp}} Kn_m + B_i^{\text{exp}} Kn_m^2, \quad (23)$$

by using a least square method, as detailed in Maurer et al. (2003) with the same working gas, in silicon micro channels with rectangular sections of high width-to-height ratio. Our measures were obtained within a narrower \mathcal{P} range (4.75 ± 0.27) and for Kn_m numbers exclusively relevant to the slip regime. The experimental values obtained for the S_f^{exp} coefficients are shown in Table 5, where the uncertainty on these coefficients is estimated using the standard error. It should be noted that for the first order fitting, the coefficient B_1^{exp} is equal to zero.

As it is well known, a second order effect according to the Knudsen number exists in slip regime and becomes more and more significant when the Knudsen number increases. In order to show that the present experiments reveal a second order effect and that the second order approach is more pertinent than the first order one over the full Knudsen number range (0.03–0.291), we calculated two additional parameters: the determination coefficient r^2 (as given in usual software Matlab) and the squared residual sum $\sum e_i^2$ (where $e_i = S_i^{\text{exp}} - S_f^{\text{exp}}$ is the local difference between the measured and fitting values, and so represents the local fitting error) to estimate the quality of the fit. Analyzing the values of these two coefficients given in Table 5 (in which the first two lines of the table correspond to the full Knudsen number range) we find that the determination coefficient r^2 of the second order fitting is closer to 1 than that of the first order. Moreover, the value of the squared residual sum $\sum e_i^2$ is also smaller for the second order fitting.

In order to supplement this analysis, the residuals e_i (fitting errors) are plotted on Fig. 5 as a function of the averaged Knudsen number. The analysis of the form of the residuals distribution shows that the residuals of second order fit are equi-distributed, whereas the

residuals of the first order fit are largely negative from 0.02 to 0.18 on the Knudsen axis, which confirms the choice of the second order fitting as more pertinent.

In order to establish the agreement between the experimental data and the first and second order models we compared the errors of measurement, which is estimated equal to 4.5% for the pressure method, with the standard error on the fit curve $\sqrt{\frac{1}{n} \sum e_i^2 / S_m^{\text{exp}}}$ (here S_m^{exp} is the averaged value of the measured values). Then the standard error of the fitting for the first order model gives 9.5 and 7.7% for the second order. Thus we find again a better agreement for the second order fitting than for the first one. Moreover, if the second order fitting error seems greater than the experimental one, the difference is more apparent than real, because the experimental error given by Eq. 9 does not include the errors coming from the normalizing experimental factor which are introduced when we change Q_m^{exp} to S_f^{exp} .

This global analysis of the whole Knudsen range may be completed and confirmed using a detailed investigation and distinguishing different Knudsen ranges (see Table 5). The table parameters show that the second order fitting becomes more and more pertinent when the Knudsen range increases with its upper border. For instance one can note that in the narrowest and lowest Knudsen zone (0.003–0.101) the first order approximation gives global satisfactory results. In this range the second order fitting is not required to obtain the mass rate values, and it appears that the measurements are not sufficiently precise to give a significant second order coefficient. Nevertheless it also appears, considering the various uncertainties on the coefficients, that the different values of A_2^{exp} and B_2^{exp} (in the different ranges) are compatible while on the contrary the different values of A_1^{exp} found for the different ranges are contradictory.

In conclusion, the second order fitting appears clearly as the most physically founded model and as the most general frame work. In our experimental conditions the measurements cannot give sufficiently pertinent values about the second order effect when the Knudsen range is restricted to (0.003–0.101), but they

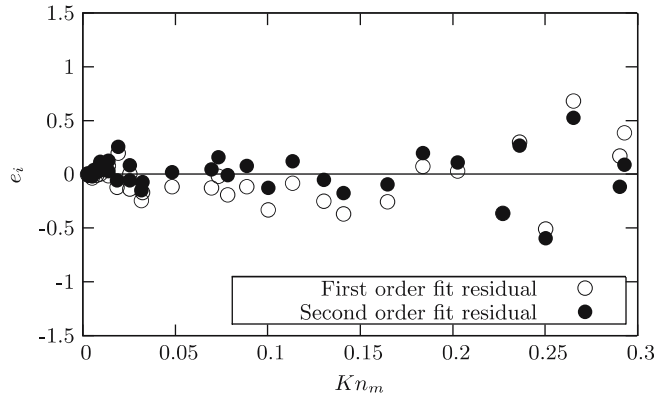


Fig. 5 Residuals from first order and second order fit

allow us to obtain second order effects significant and pertinent on the (0.003–0.291) Knudsen range. Thus, in the sequel of this article, we will use the second order fitting.

The experimental data of the dimensionless mass flow rate, fitted at second order using the non-linear least square method, are presented in Fig. 6. This fit curve represents, in itself, a significant amount of results regarding the single micro tube system.

Then basing our estimation on the two experimental coefficients A^{exp} and B^{exp} , we estimate the first σ_p and second σ_{2p} velocity slip coefficients present in Eq. 15, according to coefficients A_1 and A_2 in Eq. 17.

First order effect From the comparison of the theoretical (Eq. 21) and experimental (Eq. 23) mass flow rate expressions, coefficient A_1 may be expressed in the form:

$$A_1 = \frac{\sigma_p}{k_\lambda} = \frac{A^{\text{exp}}}{8}. \quad (24)$$

The previous relation gives the experimental estimation of the first velocity slip coefficient $\sigma_p^{\text{exp}} = 1.089 \pm 0.081$. This value is very close to two theoretical predictions of the slip coefficient: $\sigma_p = 1.012$ given by Kogan (1969) and $\sigma_p = 1.016$ given by Albertoni et al. (1963) (see Table 6). Both coefficients are obtained from the Boltzmann equation applying the BGK model in the Knudsen layer under the full accommodation assumption of the molecules at the wall.

Then we compared our results with other experimental results. Firstly with those concerning the velocity slip measured by the authors of Porodnov et al. (1974).

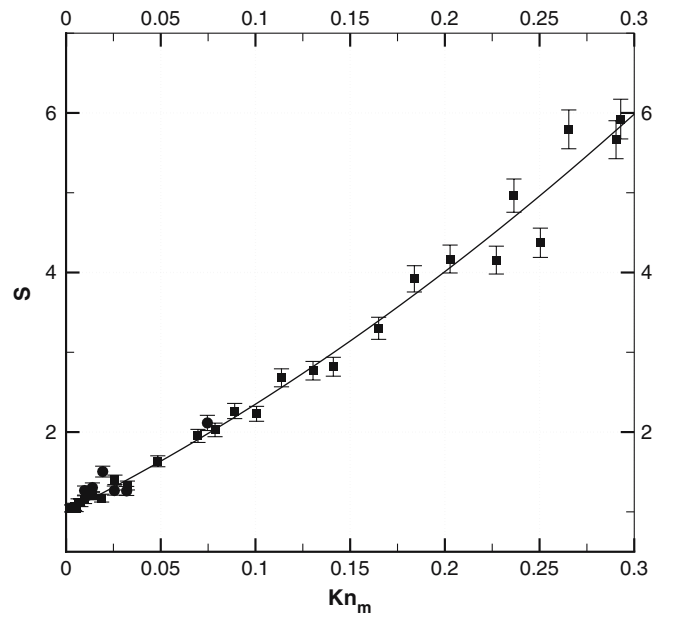


Fig. 6 The circles and squares are the experimental measurements. The solid line represents the fitting of the experimental data with a second order polynomial function (23)

Table 6 Experimental and analytical first order velocity slip coefficients

	σ_p
Kogan (1969)	1.012
Albertoni et al. (1963)	1.016
Porodnov et al. (1974)	1.192 ± 0.021
Exp. value (present results)	1.089 ± 0.081

They assumed the linear dependence of the mass flow rate on the Knudsen number, which may be justified by the narrow experimental Knudsen number range (below to 0.04) and they obtained the velocity slip coefficient from the flow rate measurements using the linear least square method. The difference between the values of the slip coefficient measured in Porodnov et al. (1974) $\sigma_p = 1.192$ and in the present work may occur because of the implementation of the mass flow rate models involving terms of the different orders in Knudsen number. The use of the second order model allows us to define the velocity slip coefficient more exactly. Moreover it should be noted that the arrangement of the surfaces for both experiments is not the same: in Porodnov et al. (1974) a packet of glass capillaries with molten walls is used, which may be another reason for the difference observed in the measured values of the velocity slip coefficient. The authors of Porodnov et al. (1974) in addition derived theoretical results assuming a diffuse molecular scattering at the wall.

We also derived an experimental value of the accommodation coefficient using the Maxwell diffuse-scattering model. The use of Maxwell's kernel for the gas-surface interaction gives the following value for the velocity slip coefficient, neglecting the Knudsen layer influence

$$\sigma_p^M = \frac{\sqrt{\pi} 2 - \alpha}{2 \alpha}, \quad (25)$$

where α is the part of the molecules reflected diffusively. Based on Eq. 25 and on the measured value of the velocity slip coefficient we can calculate the “experimental” tangential momentum accommodation coefficient using the relation

$$\sigma_p^{\text{exp}} = \frac{\sqrt{\pi} 2 - \alpha}{2 \alpha}, \quad (26)$$

this value of α is given in Table 7 with the accommodation coefficients obtained by other authors. All measurements were carried out using different experimental techniques and in the channels with different surfaces. It is to note that in the case of full accommodation, the theoretical coefficient σ_p^M , which does not include the Knudsen layer correction, is equal to 0.886.

Regarding all the results presented about the accommodation coefficient, one can conclude that both descriptions of the molecular reflection from the wall seem convenient: for the physical conditions considered,

Table 7 Experimental tangential momentum accommodation coefficients

	α
Maurer et al. (2003)	0.87 ± 0.03
Colin et al. (2004)	0.93
Arkilic et al. (2001)	0.81–0.96
Porodnov et al. (1974)	0.925 ± 0.014
Exp. value (present results)	0.933 ± 0.037

the fused silica surface may be described as a perfect diffuse surface as well as a quasi diffuse Maxwell surface (according to the accommodation coefficients deduced from the measurements).

Second order effect The value of coefficient B^{exp} confirms that a significant Kn_m second order effect exists. We can calculate the experimental coefficient A_2 from the relation:

$$B^{\text{exp}} = 16 \left(A_2(a) + \frac{a}{2k_z^2} \right) \frac{\mathcal{P} + 1}{\mathcal{P} - 1} \ln \mathcal{P}. \quad (27)$$

Two different cases are to be considered. From coefficient B^{exp} , we can estimate coefficient A_2 in the second order boundary condition for the QGD model. As mentioned above, the QGD model involves second order terms in Knudsen number and so requires a second order (also in Knudsen number) boundary condition, more consistently than the NS model. Taking $a = 1$ in Eq. 27 we obtain $A_2 = -0.527$ or $\sigma_{2p} = -0.282$. Regarding the second order coefficient, a simple meaningful comparison with the velocity slip coefficient obtained in Cercignani (1964) seems very difficult for various reasons. The author of Cercignani (1964) investigated a two-dimensional cartesian symmetry. Therefore, in order to deduce the corresponding second order results in the present cylindrical symmetry, various modelings are required. First, the second order slip coefficient depends on the channel geometry when tangential gradients exist: moreover its geometry dependence itself depends on the molecular interaction modeling (Cercignani 1964). Second, for the QGD model the definition of the mass flux vector (Elizarova and Sheretov 2001) is different from the classical NS definition used by the author of Cercignani (1964) and the QGD mass flux contains the additional terms proportional to the pressure and velocity gradients. This means that for the QGD model it is necessary to deduce a different form of second order boundary condition taking into account the particular definition of the mass flux and that the negative values of the experimentally deduced A_2 coefficient is not necessarily surprising in the QGD theoretical frames.

Implementation of the second order boundary conditions with the NS equations ($a = 0$ in Eq. 27) gives $\sigma_{2p} = 0.218 \pm 0.052$, or $A_2 = 0.408 \pm 0.098$. As mentioned above, the comparison with the coefficients obtained from existing theoretical approaches (Cercignani

Table 8 The second velocity slip coefficients

	σ_{2p}
Cercignani (1964)	0.7667
Deissler (1964)	0.883
Maurer et al. (2003)	0.204 ± 0.078
Exp. value (present results)	0.218 ± 0.052

1964; Deissler 1964) is very difficult, first of all for geometrical reasons. Both authors considered the rectangular geometries. The value of the second velocity slip coefficient was obtained in Cercignani (1964) from the Boltzmann equation applying the BGK model for the very simple case of Poiseuille flow when the streamwise velocity gradient is equal to zero. This is not the case for the flow studied here. Another theoretical analysis (Deissler 1964) which uses the concept of effective mean free path for momentum transfer without implementation of the Boltzmann equation gives a value of the second velocity slip coefficient close to that proposed in Cercignani (1964) and equal to $9\pi/32$ (see Table 8).

An experimental study of the second order coefficients was fulfilled in Maurer et al. (2003). Besides the

difficulty caused by the different geometries respectively used, there were difficulties arising from the comparison with the measured values (Maurer et al. 2003): the authors of Maurer et al. (2003) processed a large number of measures obtained for a Kn_m increasing up to 0.8 and therefore probably included a transitional regime effect in their results, whereas our experimental correlation is centered on the slip regime. Moreover they calculated results concerning a very wide \mathcal{P} experimental range while our experiments are narrowly focused on $\mathcal{P} = 4.75$. Finally, the second order coefficient appears very sensitive to the experimental errors, as shown above and as quoted in Maurer et al. (2003), and these errors in the present work have the same order of magnitude as those in Maurer et al. (2003). Nevertheless, as shown in Table 8, the results in Maurer et al. (2003) agrees with the present results.

4 Conclusion

Two techniques devoted to the measurements of gas mass flow rates in micro channels were implemented for isothermal slip flow regime. The respective errors and

Table 9 Parameters and results characterizing the experiment conditions

Table 9 Parameters and results characterizing the experiment conditions	$Q_m \times 10^{-11}$ (kg/s)	$Q_{QGD} \times 10^{-11}$ (kg/s)	Kn_m	P_{in} (Pa)	P_{out} (Pa)	T (K)
Pressure method						
87.90	86.77	0.0029	121,072.0	24,709	297.18	
67.78	67.14	0.0034	106,192.0	21,369	297.17	
52.79	52.25	0.0038	93,468.0	18,897	297.15	
38.92	38.30	0.0045	79,759.0	16,225	297.14	
26.97	27.19	0.0053	66,864.0	13,489	297.13	
20.39	19.50	0.0064	56,322.0	11,337.2	297.20	
13.46	13.12	0.0078	45,832.0	9,140.2	297.25	
8.76	8.39	0.0098	36,226.0	7,537.1	295.65	
4.48	4.30	0.0140	25,359.0	5,169.7	295.65	
2.43	2.51	0.0188	18,898.0	3,818.9	295.62	
1.51	1.41	0.0258	13,693.0	2,894.8	296.33	
0.926	0.964	0.0324	10,933.2	2,210.8	295.12	
0.506	0.498	0.0485	7,308.7	1,502.6	295.66	
0.295	0.293	0.0697	5,133.5	1,036.35	297.30	
0.242	0.250	0.0787	4,541.0	904.67	296.52	
0.210	0.211	0.0891	4,004.2	803.61	296.33	
0.162	0.180	0.1006	3,555.2	717.97	297.31	
0.151	0.154	0.1138	3,123.8	635.67	296.12	
0.120	0.132	0.1304	2,742.5	554.62	297.38	
0.104	0.121	0.1412	2,522.7	508.47	296.19	
0.0894	0.103	0.1651	2,169.5	435.64	297.41	
0.0851	0.0924	0.1840	1,937.1	390.63	296.38	
0.0745	0.0847	0.2029	1,765.0	355.62	297.43	
0.0645	0.0739	0.2366	1,504.5	304.18	296.15	
0.0596	0.0674	0.2655	1,340.3	271.19	296.18	
0.0591	0.0764	0.2273	1,566.3	315.82	296.10	
0.0514	0.0709	0.2506	1,425.8	285.60	296.67	
0.0508	0.0629	0.2928	1,218.8	245.55	296.79	
0.0496	0.0637	0.2905	1,230.9	245.02	296.64	
Drop method						
9.55	8.38	0.0097	36,620.0	7,431.2	296.85	
4.71	4.19	0.0140	25,152.0	5,504.5	296.37	
2.80	2.28	0.0194	18,058.0	3,989.1	296.19	
1.35	1.39	0.0256	13,678.0	3,054.3	296.40	
0.890	0.981	0.0320	11,058.0	2,255.3	295.33	
0.268	0.256	0.0737	4,707.0	1,101.3	296.32	
The analytical values of the mass flow rate Q_{QGD} are calculated using the measured values of pressure ratio $\mathcal{P} = P_{in}/P_{out}$ also given in this table						

The analytical values of the mass flow rate Q_{QGD} are calculated using the measured values of pressure ratio $\mathcal{P} = P_{in}/P_{out}$ also given in this table

uncertainties of both experimental methods were accurately investigated and estimated (Table 9).

A method based on the measurement of the pressure rise in the constant volume outlet tank was validated by comparing it to the classical drop method and to the analytical results of the QGD and NS continuum approaches. This method was implemented using up-to-date gauges and for low outlet pressures: in these conditions the method is clearly easy to use and suitable for the experimental determination of the micro channel mass flow rates through slip and translational regimes.

The good results obtained in slip regime notably for the accommodation coefficient and our present investigations for higher Knudsen numbers will deepen our understanding of the reflection/accommodation process at the wall and will extend our knowledge on the rarefied flow behavior.

Moreover in slip regime the results confirmed a significant Kn second order effect. Nevertheless improvements of the measurement accuracy are still necessary to confirm quantitatively the values obtained for the second order coefficient. A more precise estimation of the channel characteristic dimension is particularly needed. Using such improvements we will generalize pertinent second order velocity slips for various gases.

Acknowledgments The authors are grateful to the CNRS (Science Research Council)—project number MI2F03-45, the Conseil Régional Provence Alpes Côtes d'Azur and the SERES company for their financial support. They also thank R. Notonier and A. Tonetto from the "Service Commun de Microscopie Electronique".

References

- Albertoni S, Cercignani C, Gotusso L (1963) Numerical evaluation of the slip coefficient. *Phys Fluids* 6:993–996
- Arkilic EB, Breuer KS, Schmidt MA (2001) Mass flow and tangential momentum accommodation in silicon micromachined channels. *J Fluid Mech* 437:29–43
- Arkilic EB, Schmidt MA, Breuer KS (1997) Gaseous slip flow in long microchannels. *J Microelectromech Syst* 6(2):167–178
- Barber RW, Emerson DE (2005) Challenges in modeling gas-phase flow in microchannels: from slip to transition. In: *Proceeding of ICMM2005*, 3rd international conference on microchannels and minichannels, Toronto, pp 13–15
- Bird G (1994) *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*. Oxford University Press, New York
- Cercignani C (1964) Higher order slip according to the linearized Boltzmann equation. Institute of Engineering Research Report AS-64-19, University of California, Berkeley
- Chapman S, Cowling TG (1970) *The mathematical theory of non-uniform gases*, 3rd edn. University Press, Cambridge
- Colin S, Lalonde P, Caen R (2004) Validation of a second-order slip flow model in rectangular microchannels. *Heat Transf Eng* 25(3):23–30
- Deissler RG (1964) An analysis of second-order slip flow and temperature-jump boundary conditions for rarefied gases. *Int J Heat Mass Transf* 7:681–694
- Dong W (1956) University of California report no. UCRL-3353
- Elizarova T, Sheretov Y (2001) Theoretical and Numerical Analysis of Quasi-Gasdynamics and Quasi-Hydrodynamic. *Equ Comput Math Phys* 41:219–255
- Graur I, Méolans J, Zeitoun D (2006) Analytical and numerical description for isothermal gas flows in microchannels. *Microfluid Nanofluid* 2:64–77
- Hadjiconstantinou NG (2003) Comment on Cercignani's second-order slip coefficient. *Phys Fluids* 15(8):2352–2354
- Harley J, Huang Y, Bau H, Zemel J (1995) Gas flows in microchannels. *J Fluid Mech* 284:257–274
- Jang J, Wereley ST (2004) Pressure distributions of gaseous slip flow in straight and uniform rectangular microchannels. *Microfluid Nanofluid* 1:41–51
- Jitschin W, Röhl P (1987) Quantitative study of the thermal transpiration effect in vacuum gauges. *J Vac Sci Technol A* 5(3):372–375
- Karniadakis GE, Beskok A (2002) *Microflows: fundamentals and simulation*. Springer, Berlin Heidelberg New York
- Kogan MN (1969) *Rarefied gas dynamics*. Plenum Press, New York
- Lalonde P (2001) *Etude expérimentale d'écoulements gazeux dans les microsystèmes à fluides*. PhD Thesis, Institut National des Sciences Appliquées, Toulouse, France
- Lang H, Loyalka SK (1984) Some analytical results for thermal transpiration and the mechanocaloric effect in a cylindrical tube. *Phys Fluid* 27:1616
- Maurer J, Tabeling P, Joseph P, Willaime H (2003) Second-order slip laws in microchannels for helium and nitrogen. *Phys Fluid* 15:2613–2621
- Pong K, Ho C, Liu J, Tai Y (1994) Non-linear pressure distribution in uniform microchannels. In: *Application of microfabrication to fluid mechanics*, vol 197. ASME FED, pp 51–56
- Porodnov BT, Suetin PE, Borisov SF, Akinshin VD (1974) Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels. *J Fluid Mech* 64:417–437
- Poulter KF, Rodgers MJ, Nash PJ, Thompson TJ, Perkin MP (1983) Thermal transpiration correction in capacitance manometers. *Vacuum* 33:311–316
- Sharipov F, Seleznev V (1998) Data on internal rarefied gas flow. *J Phys Chem Ref Data* 27(3):657–706
- Tison SA (1993) Experimental data and theoretical modeling of gas flows through metal capillary leaks. *Vacuum* 44:1171–1175
- Yao Z, He F, Ding Y, Shen M, Wang X (2004) Low-speed gas flow subchoking phenomenon in long-constant-area microchannel. *AIAA J* 42(8):1517–1521
- Zohar Y, Lee SYK, Lee WY, Jiang L, Tong P (2002) Subsonic gas flow in a straight and uniform microchannel. *J Fluid Mech* 472:125–151

Tangential momentum accommodation in microtube

Timothée Ewart · Pierre Perrier · Irina Graur ·
J. Gilbert Méolans

Received: 10 September 2006 / Accepted: 29 January 2007
© Springer-Verlag 2007

Abstract Experimental investigations of isothermal steady flows for various gases have been carried out in a silica micro tube. This study is focused on the mass flow rate measurements of these flows in slip regime using a suitable powerful platform. First we analyse, for each gas, the pertinence of a first or second order continuum treatment; then we deduce from experiments, using the appropriate treatment, the tangential momentum accommodation coefficient (TMAC) of each gas. The TMAC obtained for the various pairs of gas (nitrogen, argon, helium)/surface (fused silica) exclude a full diffuse reflection.

Keywords Microscale flows · Mass transfer · Micro fluidics · Pressure measurements · Wall interactions

1 Introduction

The Micro-Electro-Mechanical-Systems open a new area in the rarefied gas experiments. Indeed, since the early eighties and the beginning of the MEMS, a lot of micro devices were designed to study gas micro flows. But channel geometries involving a rectangular (or trapezoidal) cross section have been privileged until to now (Pong et al. 1994; Harley et al. 1995; Arkilic et al. 1997, 2001; Zohar et al. 2002; Maurer et al. 2003; Colin et al. 2004). In this work we present a gas micro flow study based on micro tube experiments. In this geometry the experiments are

rare, only four different experiments involving rarefied gas flows in tubes or micro tubes have been undertaken in the last 50 years: using a tube with 3.64 cm of diameter in Dong (1956); with a package of ten tubes of a mean radius equal to 199.7 μm and also in a package of 100 tubes of a mean radius equal to 50 μm in Porodnov et al. (1974); then in Tison (1993), where the author did not measure directly the diameter of the tubes and finally with a package of 40 tubes with a diameter of 3.9 μm in Lalonde (2001). Thus, nobody performed experiments in a single micro tube characterized by a diameter precisely known. One of the reasons of this lack is due to the difficulty of measuring mass flow rates so weak as those flowing in a single micro tube (smaller than 10^{-10} kg/s): in point of fact, in a tube the mass flow rate can be from 3 to 100 times lower than that found in a rectangular channel for the same inlet/outlet pressure ratio, with the same streamwise length, and with the same small critic geometric dimension, i.e. finally for the same values of the Knudsen number. Since in micro tube the small dimension is necessary the diameter, involved in the cross sections by its square power, while in micro channel only one dimension of the rectangular section is necessary small: thus using a large width, i.e. a small height-to-width ratio it is possible to increase largely the flow rate without changing the Knudsen number. Let us add that, for the same basic geometric reasons, the dynamics of the flow in the tubes remains in any case a two-dimensional problem, contrarily to that occurs in the rectangular channels where the problem becomes three-dimensional when the height-to-width ratio is not small enough. Thus some experiments exist concerning the TMAC in MEMS but, according to our previous remarks, they occurred in rectangular channel geometries (Arkilic et al. 2001; Maurer et al. 2003; Colin et al. 2004) or using several tubes in a package (Porodnov et al. 1974). In

T. Ewart (✉) · P. Perrier · I. Graur · J. G. Méolans
Département de Mécanique Energétique - UMR CNRS
6595, Université de Provence - Ecole Polytechnique
Universitaire de Marseille, 5, rue Enrico Fermi,
13453 Marseille cedex 13, France
e-mail: timothee.ewart@polytech.univ-mrs.fr

anyway these experiments remain very few numerous compared to those carried out in the molecular beam domain (Saxena et al. 1981) which in many cases did not concern really the same accommodation coefficient. Therefore, the present determination appears of some scientific interest.

In the present study, we measure low mass flow rates in a micro tube in a 0.003–0.309 Knudsen number range, corresponding to a slip regime. We obtain satisfactory measurements with nitrogen, argon, and helium, notably implementing new powerful pressure sensors. Then we have tested, for each gas, the pertinence of a first and/or second order treatment, according to the Knudsen number, to describe our experimental results. Then using a general formulation of the slip velocity, written at the suitable order, the Navier–Stokes equations yield an analytical expression of the mass flow rate. Thus, comparing to the experimental curves, we deduce first the slip coefficients. The accommodation coefficients are calculated for each gas assuming the usual Maxwell expression of the slip coefficient and using also a slip coefficient expression deduced from the solution of the kinetic model equation (Loyalka et al. 1975). Finally the influences of various physical parameters on the TMAC are briefly discussed.

2 Experiments

The experimental method used in the present work in order to measure the mass flow rate through a micro tube involves the use of two constant volume tanks and so may denoted “constant-volume technique”. This method requires very large tank volumes, much larger than the volume of the micro tube. Large tank sizes guarantee micro flow parameters independent of the time: although detectible (through their effects), the mass variations occurring in the tanks during the experiments do not call into question the stationary assumption. Thus, we have to put bounds for the maximal suitable pressure variations in the second tank, according to the inlet and outlet conditions. The experimental set-up shown in Fig. 1 takes into account these constraints. The gas flows through a micro tube fixed between two tanks in which the pressures remain very close to constant values P_{in} and P_{out} , respectively. The maximum pressure variation in the second tank due to the gas flow through the microtube is fixed at $\pm 1\%$ of the tank pressure, averaged over the duration of the experiment. This variation range means that the required experiment duration τ will vary from 5 min for the highest mass flow rate measured (10^{-9} kg/s) to about 90 min for the lowest (10^{-13} kg/s).

The experiments were performed with a fused silica cylindrical micro tube. It is of great importance to measure

the diameter of the tube with a good accuracy because the analytical expression of the mass flow rate is proportional to the power four of the diameter. The surfaces of the inlet and outlet sections were scanned in environmental scanning mode (ESEM) with an electron microscope, and the following estimation of the diameter is obtained: $D = 25.2 \pm 0.35 \mu\text{m}$. The roughness is estimated smaller than 0.1% of the diameter D . The diameter evaluation is also carried out indirectly, derived from the measured mass flow rate of Ar in the hydrodynamic flow regime ($Kn_m = 2.32 \times 10^{-3}$) which yields $D = 25.27 \pm 0.25 \mu\text{m}$. Moreover, the measure of the length of the tube gives $L_{\text{tube}} = 5.30 \pm 0.01 \text{ cm}$, which is much greater than the diameter, so the entrance and exit effects can be neglected.

Here, we omit the detailed description of methodology and experimental set-up. The validity of the measurements and modus operandi were justified in Ewart et al. (2006). We will give only a brief description of the measurement technique. Let us write for the second tank the equation of state for an ideal gas under the form:

$$P_{out}V = mRT, \quad (1)$$

where V, R, P_{out}, T and m are, respectively, the volume, the specific gas constant, the pressure, the temperature and the mass of the gas in the outlet tank at any time t of the experiment time length τ . Let us define the variation dq of any thermodynamic parameter q , occurring in the tank during the experiment time length. According to the previous comments, these relative variations remain small, compared to 1. Therefore, one obtains from (1):

$$\frac{dm}{\tau} = \frac{V}{RT} \frac{dP_{out}}{\tau} (1 - \varepsilon), \quad \varepsilon = \frac{dT/T}{dP_{out}/P_{out}}. \quad (2)$$

In order to estimate ε we calculate firstly the temperature variation dT . In fact, when this variation is calculated directly from the standard deviation of the temperature recorded during the experiments (Ewart et al. 2006), the value of dT is overestimated by the superposition of

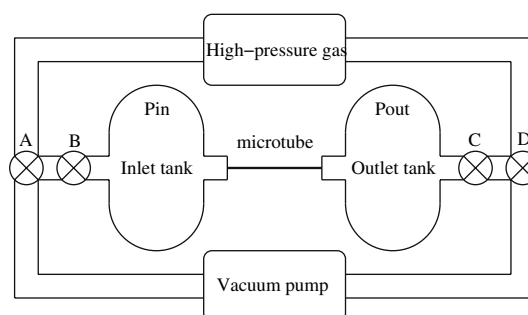


Fig. 1 Schematic of experiment

various noises (electronic and thermal noises) to the real thermal variations occurring in the tank. Therefore, two additional statistical processes are carried out in order to eliminate the influence of these noises on the temperature variation. Taking into account these estimations of the temperature variation and the pressure rise dP_{out} (fixed at $\pm 1\%$) we can conclude that $\varepsilon < 2 \times 10^{-2}$. Since ε is very small compared to 1, dm/τ may be identified to the mass flow rate Q_m flowing from the micro tube, and dP_{out} allows direct measurement of Q_m :

$$Q_m = \frac{V}{RT} \frac{dP_{\text{out}}}{\tau}. \quad (3)$$

The pressure measurements were carried out using simultaneously two detectors chosen according to the pressure range used in each experiment. In order to measure small pressure variations ($dP_{\text{out}} < 1\%$), high-resolution detectors are used (from 2×10^{-2} to 2 Pa). The errors in pressure measurements in each tank depend on the characteristics of the pressure detectors. In the pressure range observed during the experiments, the errors on the measurement of the outlet pressures were estimated smaller than 0.5%.

To determine the mass flow rate we will use the registered data for the pressure at the different time instants. The flow stationary conditions physically justify the pressure rise interpolation by means of a linear fitting function of time.

The usual evaluation of the measurements errors is applied and leads to a full uncertainty smaller than $\pm 4.5\%$ on $\Delta Q_m/Q_m$, where the non-isothermal effects are previously evaluated as $\pm 2\%$; the uncertainty on the volume measure is $\pm 2\%$ and the error on coefficient of the linear fitting of the pressure measurements gives $\pm 0.5\%$. Moreover, the leaks were estimated with two different tests as completely negligible (Ewart et al. 2006).

Finally it is to note that the capacities of the pressure sensors employed until now, have not allowed to reach the full developed transitional regime. We have determined a maximal measurement duration equal to 90 min also to be in agreement with an ambient temperature remaining quasi constant. The smallest mass flow rate which we can measure in this time period with available sensors is equal to 5.94×10^{-13} kg/s and corresponds to Argon flow with $Kn_m = 0.284$. The corresponding values of the maximal Knudsen number for nitrogen and helium are equal to 0.291 and 0.309, respectively.

3 Background theory

For many years, pressure-driven slip flows within ducts or channels have received considerable attention. Many

formulations of analytical and semi-analytical solutions have been surveyed in Karniadakis and Beskok (2002). The analytical models derived from the Navier–Stokes equations or from other continuum equation systems require the use of velocity slip boundary conditions. Several authors (Colin et al. 2004; Maurer et al. 2003) have recently proposed to use in this framework the velocity slip conditions of second order according to the Knudsen number to take better into account the rarefied effects for the moderately rarefied gas flows.

In the hydrodynamic and slip regimes the flow through the micro tube have been intensively studied theoretically. Nevertheless the questions of the choice of appropriate boundary conditions (first or second order following the Knudsen number) and the question of the limit of validity of the continuum approach (in terms of the Knudsen number range) remain open questions which are discussed below.

The flow analysis may be carried out in frame of the Navier–Stokes equations with slip boundary conditions. Assuming a second order boundary condition at the wall of a tube the slip velocity reads (Cercignani 1964)

$$u_s = \pm A_1 \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial r} \right)_w - A_2 \lambda^2 \left(\frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial u}{\partial r} \right) \right)_w, \quad (4)$$

where λ is the mean free path of the molecules which could be calculated using the hard sphere (HS) model (Chapman 1970), where $k_\lambda = \sqrt{\pi}/2$. Nevertheless, in this paper we used the variable hard sphere model (VHS) (Bird 1994) more realistic than HS model. According to this model, the coefficient k_λ is equal to $\frac{(7-2\omega)(5-2\omega)}{15\sqrt{\pi}}$, where ω , the viscosity index, depends only on the type of gas:

$$\lambda = k_\lambda \frac{\mu}{P} \sqrt{2RT}. \quad (5)$$

The coefficients A_1 and A_2 in (4) may be presented in the form:

$$A_1 = \frac{\sigma_p}{k_\lambda}, \quad A_2 = \frac{\sigma_{2p}}{k_\lambda^2}, \quad (6)$$

where σ_p and σ_{2p} are the first and second velocity slip coefficients.

It is to note that, according to Cercignani (1964), relation (4) involves here all the additional terms resulting from the wall curvature: these terms are represented by the Laplacian operator of the streamwise velocity (Cercignani 1964); thus, in the second term of right-hand side of Eq. (4), this operator, expressed in local cylindrical coordinates, reduces to its radial part, due to the symmetry. Furthermore, taking into account the Knudsen layer effect on the velocity profiles (Cercignani 1964) leads to modify the A_2 coefficient value, but not the form of Eq. (4).

The mass flow rate through the tube of diameter D , obtained from Navier–Stokes equations with the second order velocity slip condition (Ewart et al. 2006), reads

$$\dot{M} = \frac{\pi D^4 \Delta P P_m}{128 \mu \mathcal{R} T L} \left(1 + 8A_1 Kn_m + 32A_2 \frac{P_m}{\Delta P} \ln \mathcal{P} Kn_m^2 \right), \quad (7)$$

where $\Delta P = P_{in} - P_{out}$, $\mathcal{P} = P_{in}/P_{out}$, Kn_m is the mean Knudsen number, based on the mean pressure $P_m = 0.5(P_{in} + P_{out})$. Furthermore, a non-dimensional mass flow rate S may be deduced from relation (7):

$$S = \dot{M} \frac{\pi D^4 \Delta P P_m}{128 \mu \mathcal{R} T L} = 1 + 8A_1 Kn_m + 16A_2 \frac{\mathcal{P} + 1}{\mathcal{P} - 1} \ln \mathcal{P} Kn_m^2. \quad (8)$$

Expression (8) may be rewritten in the more compact form:

$$S = 1 + A^{\text{theor}} Kn_m + B^{\text{theor}} Kn_m^2. \quad (9)$$

Accordingly to the previous remarks, Eq. (4) is perfectly convenient to derive, from experiments, the complete second order slip coefficient by using Eqs. (6)–(9), supplemented with the experimental value given by expression (10). Of course, through this equation system, are also deduced “the experimental” first order coefficients and then, using various expressions proposed in the next section, the “experimental” TMAC. All these results will be given and analyzed in next section, but we can make here a preliminary remark: when comparing the various coefficients, defined here above, it appears that the slip coefficients σ_p , and σ_{2p} only depend on the molecule interactions through the viscosity coefficient μ .

4 Results and discussion

We have studied the flows of argon, nitrogen and helium in a slip regime where the mean Knudsen number varies from 0.003 to 0.3. The experiments were carried out with different pressure ratios $\mathcal{P} = [3, 4, 5]$ between the tanks (see Table 2 for details). Figure 2 shows the experimental dimensionless mass flow rates, normalized according to left-hand side of (8), for all the gases, as a function of the mean Knudsen number.

In order to estimate the velocity slip coefficients the measured dimensionless mass flow rate was fitted (see Fig. 2) with the first and second order polynomial form of the mean Knudsen number

$$S_f^{\text{exp}} = 1 + A_i^{\text{exp}} Kn_m + B_i^{\text{exp}} Kn_m^2, \quad i = 1, 2, \quad (10)$$

as it was detailed in Maurer et al. (2003) using a non-linear least square Marquard–Levenberg algorithm. The experi-

mental fitting coefficients A_i^{exp} and B_i^{exp} , where $i = 1, 2$ corresponds to the order of the polynomial form (therefore $B_1^{\text{exp}} = 0$), are calculated for all the gases and the uncertainty on these coefficients is calculated using the asymptotic standard error. These coefficients obtained for all the gases with a pressure ratio $\mathcal{P} = 5$ are reported in Table 1. In order to analyze the respective pertinence of first or second order fitting for each gas, two additional parameters are calculated: the determination coefficient r^2 and the residual variance $s_r = \sqrt{\frac{1}{n-p} \sum e_i^2}$, where $e_i = S_i^{\text{exp}} - S_{fi}^{\text{exp}}$ is the local difference between measured and fitting values, and so represents the local fitting error; n is the number of points and p is the number of unknown coefficients of the fitting model. Analyzing the values of these two coefficients, given in Table 1 only for $\mathcal{P} = 5$, (but the other \mathcal{P} values give similar results for these coefficients) we find that the determination coefficients r^2 of Argon and Nitrogen are essentially more close to 1 for the second order fitting. For the helium flow the second order coefficient r^2 is also more close to 1 than the first order one, even if the difference between the two orders is here less important. Moreover, the values of the squared residual sum are also smaller for the second order fitting in the case of all the gases. In order to supplement this analysis, the residuals e_i (fitting errors) are plotted as a function of the averaged Knudsen number for the three gases. As an example, the residual or argon are presented in Fig. 3. The analysis of the form of the distribution of the argon residuals shows that the residuals of second order fit are equi-distributed, whereas the residuals of the first order fit are largely negative from 0.003 to 0.2 on the Knudsen axis, which confirms the choice of the second order fitting as more pertinent for Argon flows. The same analysis of the form of residuals is carried out for nitrogen and helium (Fig. 3 and nitrogen). From these analyses we may conclude that the second order fitting appears clearly as the most pertinent for nitrogen and argon flows and also for the helium flow, even if, as shown in Table 1, the relative weight of the second order coefficient is smaller for helium as for the other gases. Thus, in the sequel of this paper, we will use the results of the second order fitting for all the gases.

From the comparison of the theoretical and experimental non-dimensional mass flow rate expressions (9), (10) the coefficients A_1 and A_2 from the velocity slip boundary condition (4) and respectively the slip coefficients σ_p and σ_{2p} (6) may be found from the expressions:

$$A_1 = \frac{\sigma_p}{k_\lambda} = A^{\text{exp}}/8, \quad A_2 = \frac{\sigma_{2p}}{k_\lambda^2} = \frac{B^{\text{exp}}}{16 \ln \mathcal{P} + 1} \frac{\mathcal{P} - 1}{\mathcal{P} + 1}. \quad (11)$$

The values of the coefficients σ_p and σ_{2p} are given in Table 2 for the first and second order fitting. It is to note

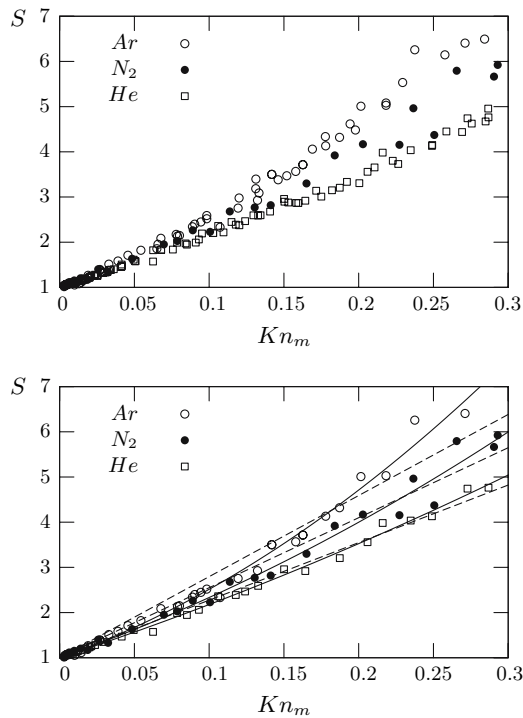


Fig. 2 Dimensionless mass flow rate for N_2 , Ar and He gases obtained according to left-hand side of (8) for $\mathcal{P}_{Th} = 3 - 5$ and fit of first (dashed line) and second (solid line) order for $\mathcal{P} = 5$

that both velocity slip coefficients depend on the molecular weight of the gases.

We also derived an experimental value of the accommodation coefficient using the Maxwell diffuse-specular scattering model. The use of Maxwell's kernel for the gas-surface interaction gives the following value for the velocity slip coefficient, neglecting the Knudsen layer influence:

$$\sigma_p^M = \frac{\sqrt{\pi} 2 - \alpha_M}{2 \alpha_M}. \quad (12)$$

As well known, in the Maxwell kernel the same coefficient α may represent the energy accommodation as well as that of any momentum component. However, in isothermal slip regime it is usual and physically justified to identify α as the TMAC. In the case of a full accommodation ($\alpha_M = 1$) the theoretical coefficient σ_p^M is equal to 0.886, which is different from the theoretical diffuse value given in Albertoni et al. (1963). As well known, this diffuse value equal to 1.016 is considered as a reference value. Therefore, we report also here a more accurate method to calculate the accommodation coefficient proposed by Loyalka et al. 1975. These authors (Loyalka et al. 1975) have calculated the slip coefficients from the BGK kinetic model equation with the diffuse-specular boundary

Table 1 Fitting parameters obtained from the experiments

$\mathcal{P}_{Th} = 5$	A_{1st}^{exp}	s_{r1st}	r_{r1st}^2	A_{2nd}^{exp}	B_{2nd}^{exp}	s_{r2nd}	r_{r2nd}^2
Nitrogen	15.49 ± 0.31	0.2115	0.9779	11.67 ± 0.97	16.63 ± 4.06	0.1931	0.9859
Argon	18.18 ± 0.39	0.2851	0.9691	13.22 ± 0.80	24.27 ± 3.70	0.1903	0.9863
Helium	12.99 ± 0.15	0.1315	0.9905	10.81 ± 0.37	9.16 ± 1.50	0.0876	0.9959

Table 2 σ_p^i and σ_{2p}^i experimental coefficients obtained from a polynomial fitting of first or second degree, α_M obtained from the velocity slip coefficient using Maxwell relation (12)

\mathcal{P}_{Th}	σ_p^{1st}	α_M^{1st}	σ_p^{2nd}	α_M^{2nd}	σ_{2p}^{2nd}	Kn_m
Nitrogen						
5	1.415 ± 0.028	0.770 ± 0.010	1.066 ± 0.088	0.908 ± 0.041	0.231 ± 0.057	0.003–0.291
Argon						
5	1.554 ± 0.034	0.726 ± 0.010	1.130 ± 0.068	0.879 ± 0.029	0.294 ± 0.045	0.003–0.302
4	1.564 ± 0.023	0.723 ± 0.008	1.169 ± 0.044	0.862 ± 0.018	0.290 ± 0.031	0.003–0.284
5–4	1.558 ± 0.021	0.725 ± 0.007	1.147 ± 0.042	0.871 ± 0.017	0.294 ± 0.029	0.003–0.302
Helium						
5	1.277 ± 0.014	0.819 ± 0.005	1.062 ± 0.036	0.910 ± 0.017	0.147 ± 0.024	0.009–0.309
4	1.193 ± 0.036	0.852 ± 0.014	1.066 ± 0.015	0.908 ± 0.008	0.118 ± 0.011	0.011–0.300
3	1.260 ± 0.018	0.826 ± 0.007	1.044 ± 0.040	0.918 ± 0.018	0.166 ± 0.030	0.010–0.309
5–3	1.252 ± 0.009	0.829 ± 0.004	1.052 ± 0.020	0.914 ± 0.009	0.148 ± 0.014	0.009–0.309

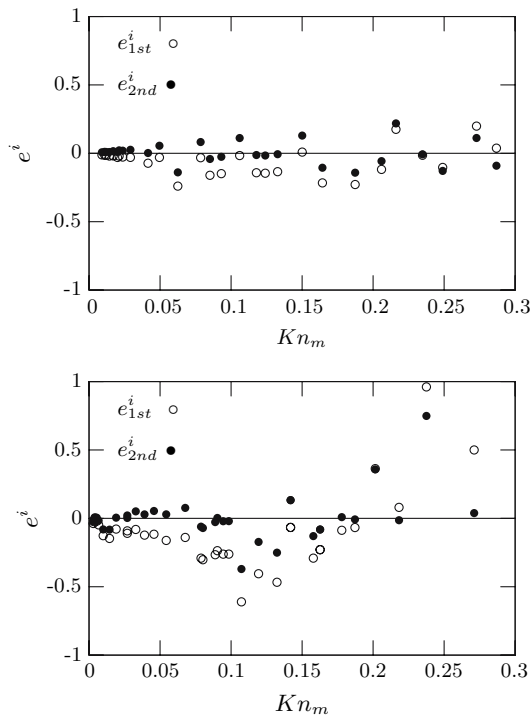


Fig. 3 He (up) and Ar (down) residuals for $\mathcal{P} = 5$

conditions for the different values of the accommodation coefficient α_L using the variational method. Then the calculated values of the slip coefficients have been fitted in order to obtain a simple relation connecting slip and accommodation coefficients:

$$\sigma_p^L = \frac{\sqrt{\pi}2 - \alpha_L}{2 \alpha_L} (1 + 0.1621\alpha_L). \quad (13)$$

The values of α calculated from the experimental values of the velocity slip coefficient (obtained from the second order fitting σ_p^{2nd}) using relations (12) (α_M) and (13) (α_L) are given in Table 3. In this table are also given the Maxwell accommodation coefficients calculated by other authors using first order (Porodnov et al. 1974; Arkilic et al. 1997) and second order (Maurer et al. 2003; Colin et al. 2004)

treatment. It is necessary to note, that the implementation of the relation (13) is more accurate from the kinetic theory point of view, but it does not change, basically, the character of the gas–wall interaction, since the Maxwellian diffuse-specular scattering is not called into question. As shown in Table 3, applying the relation coming from the kinetic theory, the surfaces under consideration (fused silica) must be described as quasi-diffuse surface.

The previous data may be summarized as follows:

- In the investigated Knudsen range the relative weight of the second order effect (B_{2nd}/A_{2nd}) increases with the molecular mass and does not depend significantly on the molecular internal structure (see Table 1). Furthermore, basing our comments on the investigated gases we note that both first and second order slip coefficients increase with the molecular weights. Moreover, this evaluation is preserved when changing the order of the fitting.
- The TMAC deduced are strictly smaller than 1 excluding a complete diffuse reflection on the fused silica. The accommodation coefficient for Helium is greater than the other gas coefficients.
- Table 1 shows a good agreement of the present values with other authors experimental results if considering that the geometry of Arkilic et al. (1997), Maurer et al. (2003), Colin et al. (2004) was not circular, that the surface materials were generally not exactly the same (generally silica and silicon are both involved for a part in the channel shape), and that finally the pressure is generally not the same; moreover, certain authors used a first order treatment.
- In order to study the detailed influence of geometry or pressure ratio on the TMAC, more systematic experiments would be needed.

5 Conclusions

This work contributes to clarify the validity domains of slip regime modelling using first or second order boundary

Table 3 TMAC obtained from the present experiments and by other authors from various models: * is the first order fitting, ** is the second order fitting

	Nitrogen	Argon	Helium
Porodnov et al. (1974)*	0.925 ± 0.014	0.927 ± 0.028	0.895 ± 0.004
Arkilic et al. (1997)*	0.81–0.96	0.7–1	–
Maurer et al. (2003)**	0.87 ± 0.03	–	0.91 ± 0.03
Colin et al. (2004)**	0.93	–	0.93
α_M (present paper)**	0.908 ± 0.041	0.871 ± 0.017	0.914 ± 0.009
α_L (present paper)**	0.981 ± 0.041	0.942 ± 0.017	0.986 ± 0.009

All the accommodation coefficients are calculated from relation (12) except the last line of the table where the accommodation coefficient results from (13)

conditions. For the gases considered in the 0.003–0.3 Kn range, in tube geometry, the second order fitting seems the most convenient. The TMAC determination leads to conclude that the He, Ar, and N_2 molecules are not reflected on silica surface following a full diffuse reflection. The helium TMAC appears significantly greater than those of two other gases. More generally the TMAC seems decreasing when the molecular weight increases and this evaluation is maintained by changing the slip coefficient model. To conclude on influence of the inlet/outlet pressure ratio (or of geometry) on the accommodation process (for a same Knudsen numbers) would need more systematic experiments.

Acknowledgments The authors are grateful to the CNRS (National Center of Scientific Research—project number MI2F03-45), the Conseil Régional Provence Alpes Côtes d’Azur and the SERES company for their financial support.

References

- Albertoni S, Cercignani C, Gotusso L (1963) Numerical evaluation of the slip coefficient. *Phys Fluids* 6:993–996
- Arkilic EB, Schmidt MA, Breuer KS (1997) *J Microelectromech Syst* 6(2):167–178
- Arkilic EB, Breuer K, Schmidt M (2001) *J Fluid Mech* 437:29–43
- Bird GA (1994) *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*. Oxford University Press, New York
- Cercignani C (1964) Higher order slip according to the linearized Boltzmann equation. Institute of Engineering Research Report AS-64-19, University of California, Berkeley
- Chapman S, Cowling TG (1970) *The mathematical theory of non-uniform gases*, 3rd edn. University Press, Cambridge
- Colin S, Lalonde P, Caen R (2004) *Heat Transfer Eng* 25(3):23–30
- Dong W (1956) University of California Report No. UCRL-3353
- Ewart T, Perrier P, Graur I, Méolans JG (2006) *Experiments in fluids* 41(3):487–498
- Harley J, Huang Y, Bau H, Zemel J (1995) *J Fluid Mech* 284:257–274
- Karniadakis GE, Beskok A (2002) *Microflows: fundamentals and simulation*. Springer, Berlin
- Lalonde P (2001) *Etude expérimentale d’écoulements gazeux dans les microsystèmes et fluides*. Ph.D. thesis, Institut National des Sciences Appliquées, Toulouse, France
- Loyalka SK, Petrellis N, Stvorik TS (1975) Some numerical results for the BGK model: thermal creep and viscous slip problems with arbitrary accommodation at the surface. *Phys Fluids* 18(N9):1094–1099
- Maurer J, Tabeling P, Joseph P, Willaime H (2003) *Phys Fluid* 15:2613–2621
- Pong K, Ho C, Liu J, Tai Y (1994) *Appl Microfabricat Fluid Mechan ASME* 197:51–56
- Porodnov BT, Suetin PE, Borisov SF, Akinshin VD (1974) *J Fluid Mech* 64:417–437
- Saxena SC, Joshi RK (1981) Data series on material properties. In: *Thermal accommodation and adsorption coefficients of gases*, vol II.1
- Tison SA (1993) *Vacuum* 44:1171–1175
- Zohar Y, Lee SYK, Lee WY, Jiang L, Tong P (2002) *J Fluid Mech* 472:125–151

Mass flow rate measurements in a microchannel, from hydrodynamic to near free molecular regimes

TIMOTHÉE EWART, PIERRE PERRIER,
IRINA A. GRAUR AND J. GILBERT MÉOLANS

Université de Provence – Ecole Polytechnique Universitaire de Marseille,
Département de Mécanique Energétique – UMR CNRS 6595,
5 rue Enrico Fermi, 13453 Marseille cedex 13, France
timothee.ewart@polytech.univ-mrs.fr

(Received 18 July 2006 and in revised form 10 March 2007)

Helium mass flow rates in a microchannel were measured, for a wide Knudsen-number range, in isothermal steady conditions. The flow Knudsen numbers, considered here, cover the range from continuum slip regime to the near free molecular regime. We used a single-channel system involved in an experimental platform more powerful than those previously used. The experimental errors and uncertainties were accurately investigated and estimated. In the continuum slip regime, it was found that the first-order approach is pertinent for Knudsen number between 0.03 and 0.3. Moreover, the slip coefficient was deduced by comparing the experiments with the theoretical first-order slip continuum approach. For Knudsen number between 0.03 and 0.7, a polynomial second-power form is proposed for the mass flow rate expression. Otherwise, the experimental results on the mass flow rate were compared with theoretical values calculated from kinetic approaches over the 0.03–50 Knudsen number range, and an overall agreement appears through the comparison. It was also found, when the Knudsen number increased, that the wall influence on measurement occurred first through the accommodation process in the transition regime followed by the wall influence through the aspect ratio in the free molecular regime.

1. Introduction

The development of microelectromechanical systems (MEMS) requires correct prediction of the rarefied flows occurring in many kinds of small devices, such as micro-pumps and micro-sensors. The necessity of optimizing their designs has opened new prospects in the domain of rarefied gas experiments. MEMS appeared in the early 1980s, and since then many papers on gas microflows have been published. These studies concentrated on channel geometry and were limited to slip and near transitional regimes (Pong *et al.* 1994; Harley *et al.* 1995; Arkilic *et al.* 1997, 2001; Zohar *et al.* 2002; Maurer *et al.* 2003; Colin, Lalonde & Caen 2004).

In the present work, we extend the mass flow rate measurements for gas microflows ranging from the continuum to the near free molecular regime, based on a single microchannel. For such a geometry and for such a wide range of flow regimes, very few measurements have been carried out: over the last fifty years, only one experimental series involving different microchannels has been presented (Porodnov *et al.* 1974), whereas many measurements have been carried out for the tube geometry

from the continuum to the free molecular regime (Dong 1956; Porodnov *et al.* 1974; Tison 1993). The present measurements involve two main original features (especially when compared to the measurements performed by Porodnov *et al.* 1974): first, our experiments are carried out for inlet/outlet pressure ratios ranging between 3 and 5, i.e. for non-dimensional pressure gradients of the same order as the pressure itself, whereas in the Porodnov *et al.* (1974) experiments, the relative inlet/outlet pressure difference is smaller than 1 %; secondly, the Porodnov *et al.* (1974) measurement method is an unsteady procedure giving the gas volume flow rate whereas we use a new measurement technique (Ewart *et al.* 2006) which allows us to measure very low mass flow rates ($<10^{-12}$ kg s $^{-1}$) using a sensitive pressure gauge in order to detect very small pressure rises in the outlet tank. The lack of results concerning the free molecular regime in microchannels can be explained by the difficulties encountered so far in accurately measuring such low mass flow rates.

The purpose of the present study is two-fold: (i) completing the database of mass flow rate measurements, obtained in a single microchannel, ranging from the continuum slip regime to the near free molecular regime; (ii) exploring the properties of the gas/surface interaction according to the different flow regimes investigated here and also according to various pressure gradient mean values. Therefore, in the slip regime, the measured data of mass flow rates are compared with the analytical solution of the Navier–Stokes equations associated to the first-order boundary condition. The ‘experimental’ velocity slip coefficient and the tangential momentum accommodation coefficient (TMAC) are derived using this type of boundary condition and the pertinence of a Knudsen number first-order treatment for helium is shown in the 0.03–0.3 Knudsen number range. In the transition regime and in the near free molecular regime, the measured data are compared with the theoretical results deduced from the Boltzmann equation using various models: the BGK model (Loyalka 1975; Loyalka, Stvorik & Park 1976) or the S model (Sharipov 1999a). The theoretical results obtained by solving the linearized Boltzmann equation (Ohwada, Sone & Aoki 1989; Hickey & Loyalka 1990) were also considered for comparison. Globally, our measurements appear in good agreement with the theoretical results. Nevertheless, the full diffuse reflection at the wall, largely assumed in the theoretical kinetic approaches, does not yield satisfactory fitting between the theoretical results and the experimental mass flow rate values. Thus, the diffuse specular model (according to a Maxwell-type reflection law) seems more suitable for describing the gas/wall interaction. However, the tangential momentum accommodation coefficients deduced using this theoretical frame turn out to be different in the slip regime and in the near free molecular regime. Further investigations and complementary analyses are necessary to confirm this conclusion.

2. Experiments

2.1. Description of the methodology and experimental set-up

The experimental method used in the present work to measure the mass flow rate through a microchannel involves the use of two constant volume tanks and so may be denoted a ‘constant-volume technique’. This method requires very large tank volumes, much larger than the volume of the microchannel. Large tank sizes guarantee that the microflow parameters are independent of time: although detectible, the mass variations occurring in the tanks during the experiments do not call into question the steady assumption. Thus, we must also set a limit for the maximal suitable variation of the pressure in the second tank, according to the inlet and outlet conditions. These

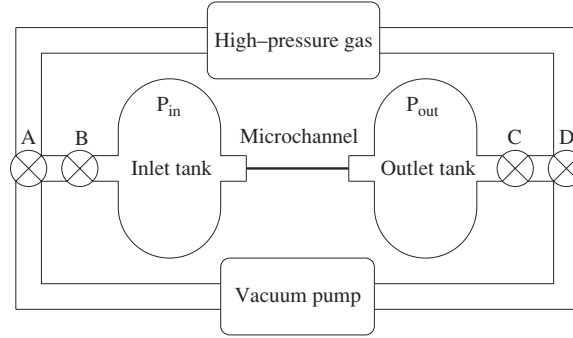


FIGURE 1. Mass flow experiment diagram. The valves A to D are used to impose and to adjust the pressure in the inlet and outlet tanks.

Detectors	A	B	C	D
Full scale FS (Pa)	133 322	13 332.2	1333.22	133.322
Pressure limit max (Pa)	133 322	13 332.2	1333.22	133.322
Pressure limit min (Pa)	13 332	1333.2	133.32	13.332
Accuracy		0.20 % of reading		
Temperature effect on zero		0.0050 % FS/K		0.015 % FS/K
Temperature effect on span		0.01 % of reading/K		
Resolution		0.0015 % FS		0.0025 % FS
Inficon CDG	25-1000 T	25-100 T	25-10 T	45-1 T

TABLE 1. Technical data for the gas detectors manufactured by Inficon. The four detectors have similar characteristics, but their full scales are different.

constraints are taken into account in the experimental set-up (figure 1). The gas flows through a silicon microchannel fixed between two tanks in which the pressures remain very close to the constant values P_{in} and P_{out} , respectively. The pressure variation in the second tank owing to the gas flow through the microchannel is set at $\pm 1\%$ of the tank pressure averaged over the experiment. Consequently, the relative pressure variation in the first tank remains close to the $\pm(0.2\% - 0.33\%)$ depending on the pressure ratio between the tanks. This pressure variation range corresponds to a required experiment duration τ ranging from about a few seconds for the highest mass flow rate measured ($10^{-9} \text{ kg s}^{-1}$) to about 120 s for the lowest ($10^{-13} \text{ kg s}^{-1}$).

The pressure measurements are carried out using simultaneously two detectors chosen according to the pressure range (see table 1). One is located in the first tank upstream of the microchannel and the other in the second tank downstream of the microchannel. The errors in pressure measurements in each tank depend on the characteristics of the pressure detectors (table 1). Thus, in the pressure range observed during the experiments, the errors on the measurement of the outlet pressures may be estimated to be smaller than 0.5 %.

It is also very important to measure the dimensions of the channel accurately because the geometrical characteristics have a great influence on the mass flow rate: for example, the analytical expression of the mass flow rate, in hydrodynamic and slip regimes, is proportional to the power three of the channel height. Therefore, the surfaces of the inlet and outlet sections have been scanned in the environmental scanning mode (ESEM) with an electron microscope and the following estimations

of the channel dimensions have been obtained: the channel height H is $9.38 \pm 0.2 \mu\text{m}$, its width w is $492 \pm 1 \mu\text{m}$ and its length L is $9.39 \pm 0.1 \text{ mm}$. Since the length of the channel is much greater than its height, the channel end effects can be neglected. Moreover, the roughness of the channel walls is estimated to be smaller than 20 nm.

The details about the connections required in the gas circuit and the estimation of the leakage may be found in Ewart *et al.* (2006). The experiments are performed within a narrow temperature range, excluding any heat source in the environment. During each experiment, the temperature is not maintained, but controlled to be sufficiently constant to justify the isothermal assumption as quantified in the following section.

2.2. Analysis of the non-isothermal effects

The technique used to measure the mass flow rate consists in determining in the outlet tank a small pressure change due to the mass flowing from the microchannel. The temperature variation in the outlet tank could directly perturb the significance of the measurement. To make this clearer, let us write for this tank the law of perfect gases in the form:

$$P_{out} V = m \mathcal{R} T, \quad (2.1)$$

where V represents the outlet tank volume which remains constant during the experiment, and \mathcal{R} is the specific gas constant. P_{out} , T and m are, respectively, the pressure, temperature and mass of the gas in the outlet tank, at any time t of the experiment time length τ . Let us define the variation dq of any thermodynamic parameter q , occurring in the tank during the experiment time length (whatever the reason for these variations). According to the comments made in the previous section, these relative variations remain small, compared to 1. Therefore, they are deduced from (2.1), verifying the relation

$$\frac{dP_{out}}{P_{out}} = \frac{dm}{m} + \frac{dT}{T}, \quad (2.2)$$

which is easily transformed into:

$$\frac{dm}{\tau} = \frac{V}{RT} \frac{dP_{out}}{\tau} (1 - \varepsilon), \quad \varepsilon = \frac{dT/T}{dP_{out}/P_{out}}. \quad (2.3)$$

If ε is very small compared to 1, then dm/τ may be identified as the mass flow rate Q_m flowing from the microchannel, and dP_{out} (termed δP_{out} below) will allow direct measurements of Q_m . The maximal instantaneous temperature departure (from its initial value) registered during the experiments is smaller than half a degree. Such a departure certainly overestimates the probable temperature variation at any time. Therefore, from the various points acquired during the experimental time τ , we calculate the mean temperature value \bar{T} and its corresponding standard deviation s . The specification of the standard deviation is influenced (and so overestimated) by the noise of the temperature probe and electronic acquisition card. Nevertheless, in the present experiment, this estimation appears as a pertinent evaluation of the probable temperature variation. In the most unfavourable case, this estimation leads to a relative variation $\delta T/T = s/T$ around the mean temperature equal to 0.0002, lower than 0.01 for the relative variation $\delta P_{out}/P_{out}$: ε is clearly smaller than 0.02. Thus, the measurement based on the pressure rise may be considered as the measurement of an isothermal mass flow rate,

$$Q_m = \frac{V}{\mathcal{R} T} \frac{\delta P_{out}}{\tau}, \quad (2.4)$$

affected by a specific relative error of ± 0.02 due to the temperature variations (see (2.6)).

2.3. Pressure rise measurements and experimental error

Since the effects of the temperature variation are negligible, we may consider the flow through the microchannel as a steady flow occurring between two tanks maintained at pressures P_{in} and P_{out} , practically constant, respectively, with variations of the order of $\pm 1\%$ in the outlet tank and of the order of $\pm(0.2\% - 0.33\%)$ in the inlet tank (see §2.1). These variations are smaller than the experimental error, and are consistent with the steady assumption. Moreover, the isothermal mass flow rate may be expressed in the form (2.4). To determine this mass flow rate, we will use the registered data for pressures P_i at time instants t_i . The stationary flow conditions physically justify a pressure rise interpolation by means of a linear function of time using a simple least-squares fit

$$P_f(t) = at + b, \quad a = \frac{\delta P_{out}}{\tau}. \quad (2.5)$$

The calculation of the coefficient a is characterized by a convenient value of the usual determination coefficient r^2 , greater than 0.9993. Under the reasonable assumption of negligible errors in determining the fixed time values t_i , the error on coefficient a is calculated using the classical expression of the errors on the linear fitting coefficients of the least-squares method and yields a relative error smaller than $\pm 0.1\%$, in all the cases where the error calculation is fulfilled; then to increase the reliability of this evaluation we adopt a large upper bound of this error value ($\pm 0.5\%$). Thus, the usual evaluation of the measurement errors results from (2.4), (2.5) as:

$$\frac{\Delta Q_m}{Q_m} = \frac{\Delta V}{V} + \frac{\Delta T}{T} + \frac{\Delta a}{a}, \quad (2.6)$$

where $\Delta T/T$, obtained through the temperature measurements, is negligible, but where the non-isothermal effects previously evaluated ($\pm 2\%$) must be taken into account in the evaluation of $\Delta Q_m/Q_m$. $\Delta V/V$ is the uncertainty on the volume measurement ($\pm 2\%$) and $\Delta a/a$ is the error on coefficient a ($\pm 0.5\%$ as seen above). Moreover, since the leaks are estimated as totally negligible (Ewart *et al.* 2006), we do not integrate them in the total uncertainty on the mass flow rate. Therefore, we obtain a full uncertainty on $\Delta Q_m/Q_m$ smaller than $\pm 4.5\%$. The capabilities of the sensors and vacuum pump employed so far did not allow us to reach the full free molecular regime. Using the more powerful equipment now available will make it possible to extend the investigations up to Knudsen numbers about five times higher.

3. Background theory

The flow in a rectangular channel has been studied experimentally for Knudsen numbers ranging from 0.03 to 50, which means that the observed flow regime changes from the hydrodynamic to the near free molecular regime. Many different theoretical and numerical approaches have been used to solve the problem of gas flow through a long channel (or two parallel plates) under isothermal flow conditions for a wide Knudsen-number range (see Sharipov & Seleznev 1998; Karniadakis & Beskok 2002; Graur, Méolans & Zeitoun 2006). We will present briefly the theoretical approaches used in order to compare the measured and theoretical values of the mass flow rate and of the velocity slip coefficients.

3.1. Hydrodynamic and slip regimes

In the hydrodynamic and slip regimes, the flow through a rectangular channel has been intensively studied and the problem of the choice of the appropriate boundary conditions (first- or second-order following the Knudsen number) and the problem of the limit of validity of the continuum approach (in terms of the Knudsen-number range) remain an open question. In hydrodynamic and slip flow regimes, the flow analysis may be developed using the continuum macroscopic equations (Navier–Stokes equations) supplemented with slip boundary conditions at the wall. Assuming a possible second-order boundary condition at the wall, in the isothermal case the slip velocity reads:

$$u_s = \pm A_1 \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_w - A_2 \lambda^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)_w, \quad (3.1)$$

where λ is the mean free path of the molecules which may be calculated using the following well-known expression, very similar to that of the hard-sphere (HS) model (Chapman & Cowling 1970)

$$\lambda = k_\lambda \frac{\mu}{P} \sqrt{2\mathcal{R}T}, \quad k_\lambda = \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \quad (3.2)$$

In the physical conditions of the present study, we can use only the first-order boundary condition, so the coefficient $A_2 = 0$ and the slip condition (3.1) reads:

$$u_s = \pm A_1 \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_w. \quad (3.3)$$

In this theoretical frame, the coefficient A_1 may be presented in the form:

$$A_1 = \frac{\sigma_p}{k_\lambda}, \quad (3.4)$$

where σ_p is the velocity slip coefficient. The mass flow rate through the rectangular channel obtained from the Navier–Stokes equations with the first-order velocity slip condition (Graur *et al.* 2006) is:

$$\dot{M} = \frac{H^3 w \Delta P P_m}{12 \mu \mathcal{R} T L} (1 + 6 A_1 K n_m), \quad (3.5)$$

where $\Delta P = P_{in} - P_{out}$, $\mathcal{P} = P_{in}/P_{out}$ and $K n_m = \lambda/H$ is the mean Knudsen number, based on the mean pressure $P_m = 0.5(P_{in} + P_{out})$. This mean pressure is used in (3.2) in order to determine the averaged mean free path. The influence of the lateral walls on the mass flow rate is not taken into account, which is a correct approximation when $H \ll w$, as is the case here. According to Sharipov (1999a) the lateral wall influence may be taken into account by the factor $1 - 0.63H/w$ multiplying the mass flow rate \dot{M} , which gives 0.99 in our case where $H/w = 0.019$.

Furthermore, a non-dimensional mass flow rate may be deduced from (3.5):

$$S = \dot{M} / \frac{H^3 w \Delta P P_m}{12 \mu \mathcal{R} T L} = 1 + 6 A_1 K n_m. \quad (3.6)$$

Equation (3.6) may be rewritten in the more compact form:

$$S = 1 + A^{theor} K n_m, \quad (3.7)$$

where $A^{theor} = 6A_1$. The analytical expressions of the mass flow rate (3.5)–(3.7) will be used for the calculation and the comparison with the corresponding measured

values. We use the measured values of the mass flow rate for two main purposes: to obtain the ‘experimental’ velocity slip coefficient; and to establish the limit of the applicability of the continuum equations for this kind of flow. The term σ_p appears to depend on the gas interaction model only through the viscosity μ .

3.2. Free molecular regime

In the case of a free molecular regime, the mass flow rate between two parallel plates was obtained analytically by Cercignani & Daneri (1963) under the assumption of full accommodation of the molecules at the wall and by Sharipov & Seleznev (1998) in the case of the diffuse-specular scattering at the wall. For a channel of finite width, the mass flow rate of the free molecular regime was found by Loyalka *et al.* (1976) for a diffuse reflection of the molecules from the wall. In the case of two parallel plates, the dimensionless mass flow rate, reduced as usual in the transitional regime, tends to infinity when the Knudsen number increases (Cercignani & Daneri 1963). This may be partly due to the characteristic mass flow rate chosen to define the non-dimensional flow rate (see §3.3); but whatever the choice, the influence of the section aspect ratio will increase when the Knudsen number increases because then the gas/gas collisions vanish and only the gas/wall collisions govern the flow behaviour. Therefore in §4, we will see that the models involving two parallel plates differ more and more from our experimental results when Kn increases strongly.

3.3. Transition flow regime

The most complicated domain for modelling is the transition flow regime, where the Boltzmann equation should be solved. A review of the main results obtained in this field may be found in Sharipov & Seleznev (1998). We will detail only the results which are the most useful for the analysis of our experimental measurements. We will start with the modelling of the flow between two parallel plates. The expression of a volume flow rate between two parallel plates, for a large Knudsen-number range, was obtained by Cercignani & Daneri (1963) solving the BGK kinetic equation by the discrete ordinate method and assuming a diffuse reflection of the molecules from the wall. The BGK model again, this time associated with a diffuse-specular reflection on the solid surface, was also considered by Loyalka (1975). Moreover, the linearized Boltzmann equation for the flow between two parallel plates was solved by Ohwada *et al.* (1989) and Hickey & Loyalka (1990) for hard-sphere molecules and for a diffuse reflection as boundary condition. The difference between the solution of the BGK equation and that of the Boltzmann equation is only about 2 % (Sharipov & Seleznev 1998). The finite dimensions of the rectangular channel were taken into account by Loyalka *et al.* (1976) when solving numerically the BGK kinetic equation using a diffuse scattering. In this same case of rectangular channels with arbitrary height to width ratios, two modellings of the collision integral: the BGK-model (Sharipov 1999a) and the S-model (Sharipov 1999b), both assuming a complete accommodation of the molecules on the wall, were compared. In the isothermal case, the difference between the mass flow rates obtained with these two models is less than 1 % (Sharipov & Seleznev 1998). Since, as seen above, the difference between the solution of the linearized Boltzmann equation and those of the two kinetic equation models is also small, we will use below only the results given by the solution of the BGK model (Sharipov 1999a) and (Loyalka 1975) in order to compare the theoretical results with our measurements.

All the approaches presented above use the same basic assumption: the local pressure gradient, defined as follows, is small:

$$\nu = \frac{H}{P} \frac{dP}{dx} \ll 1. \quad (3.8)$$

According to many authors (quoted above) this assumption allows the linearization of the kinetic equation and that of the boundary conditions around an equilibrium state, and so the calculation of a dimensionless flow rate Q through a cross-section of the channel (or through a standard width, in the case of two infinite plates). This dimensionless mass flow rate is

$$Q = -\frac{\sqrt{2\mathcal{R}T}}{HwP\nu} \dot{M}, \quad (3.9)$$

when the local pressure gradient dP/dx does not vary too much along the channel, (3.9) does not vary either. Moreover, in this case, the dimensionless flow rate is roughly independent of the mean pressure gradient characterizing the flow, but it depends mainly on its rarefaction parameter (i.e. on an inverse Knudsen number):

$$\delta = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{H}{\lambda}. \quad (3.10)$$

This non-dimensional mass flow rate (3.9) considered as a function of the local rarefaction parameter (3.10) was calculated by many authors (Loyalka 1975; Loyalka *et al.* 1976; Ohwada *et al.* 1989; Hickey & Loyalka 1990; Sharipov 1999*a, b*). In all these theoretical papers, the rarefaction parameter δ is supposed practically constant along the channel. This assumption seems to be much more restrictive than (3.8). However, in our experimental measurements, the pressure variations along the channel are considerable (the ratio between the pressures in the inlet and outlet tanks ranges between 3 and 5), and so the pressure ratios are very high compared to 1 and the rarefaction parameter is not constant along the channel. However, some authors (Sharipov & Seleznev 1998), consider that in a long channel, the local pressure gradient defined as in (3.8) is always small at any pressure ratio, then it is possible to apply this theoretical approach in the case of high pressure ratios, but it is necessary to take into account the changes in the rarefaction parameter owing to the pressure changes that are not small.

In order to compare our experimental results with existing theoretical models, we adopted this point of view; i.e. we consider our theoretical results obtained in different flows as being obtained in the same flow at different locations of the channel and so for different local values of the rarefaction parameter. Nevertheless, in practice, it is difficult to compare the measured and the calculated mass flow rates using the dimensionless form (3.9), as the local pressure and local rarefaction parameter are unknown. Therefore, integrating the two members of (3.9) along the channel and using the property of the mass flow rate conservation, we deduce the following:

$$G = \frac{L\sqrt{2\mathcal{R}T}}{H^2w(P_{in} - P_{out})} \dot{M}, \quad (3.11)$$

with

$$G(\delta_{in}, \delta_{out}) = \frac{1}{\delta_{out} - \delta_{in}} \int_{\delta_{in}}^{\delta_{out}} Q(\delta) d\delta. \quad (3.12)$$

As noted in Sharipov (1999*a*), G , which is the mean value of Q along the channel, no longer depends on the local pressure gradient, but only on its mean value.

\mathcal{P} Quantity	5		4		3	
	Min	Max	Min	Max	Min	Max
Mass flow rate ($10^{-13} \text{ kg s}^{-1}$)	4.94	21 100	5.29	22 500	8.16	15 100
Inlet pressure (Pa)	60.4	109 825	65.1	115 474	121.2	96 665
Outlet pressure (Pa)	12.2	22 633	15.9	29 275	40.3	32 654
Average Knudsen number Kn_m	0.027	50.2	0.025	45.4	0.028	22.76
Experiment \mathcal{P}_E	4.82	5.14	3.90	4.11	2.90	3.06
Centred \mathcal{P}_C	4.98		4.01		2.98	

TABLE 2. Experimental pressure range. \mathcal{P} represents the desired ratio P_{in}/P_{out} , whereas \mathcal{P}_E is the real ratio for each measurement, \mathcal{P}_C is the mean experimental ratio of \mathcal{P}_E .

The equations (3.11) and (3.12) may be used to calculate numerically the reduced mass flow rate $G(\delta_{in}, \delta_{out})$ from the table of $Q(\delta)$ in Sharipov (1999a), where this non-dimensional mass flow rate Q has been obtained from the BGK kinetic equation for rectangular channels with various aspect ratios. In order to analyse the influence of the gas/wall interaction on the mass flow rate, we will also use these relations to compare our experimental data to the reduced mass flow rate obtained from the BGK model kinetic equation used with a diffuse-specular scattering in Loyalka (1975): he considers the flow between two parallel plates and we compare the measured and theoretical values of the mass flow rate per width unit. A solution of the BGK equation also with a diffuse-specular scattering is presented in Loyalka *et al.* (1976) for a channel of finite rectangular section with an aspect ratio of 1, which unfortunately is different from the very small ratio used in our experiments.

4. Results and discussion

The helium flow is studied for different flow regimes: from the hydrodynamic regime for which the mean Knudsen number is 0.03 to the near free molecular regime corresponding to a mean Knudsen number of 50. Each experiment is carried out with a constant pressure ratio \mathcal{P} between the tanks. The real pressure ratios \mathcal{P}_E maintained in each experiment lie within narrow bands centred around three pressure ratios \mathcal{P}_C close to $\mathcal{P} = 3, 4$ and 5, respectively. The properties of these three series are summarized in table 2.

The total Knudsen-number range investigated is too wide to be globally analysed using a continuum approach. Therefore, we split the total Knudsen number range into several parts and we consider first a part of this range below a maximum Knudsen number of 0.7, relevant to the slip regime and, probably, to the beginning of the transitional regime.

4.1. Polynomial expressions of the mass flow rate in slip and near transitional regimes

In this first range, the experimental dimensionless mass flow rate data are fitted with first- and second-power polynomial forms of Kn_m :

$$S_f^{exp} = 1 + A_i^{exp} Kn_m + B_i^{exp} Kn_m^2, \quad i = 1, 2, \quad (4.1)$$

by using a nonlinear least-squares method (Maurer *et al.* 2003), in order to describe these regimes. Here, i corresponds to the order of the polynomial form (therefore $B_1^{exp} = 0$).

\mathcal{P}	A_1^{exp}	s_{r_1}	r_1^2	A_2^{exp}	B_2^{exp}	s_{r_2}	r_2^2
Knudsen range (0.03–0.3)							
5	8.30 ± 0.08	0.064	0.991	7.58 ± 0.20	3.418 ± 0.90	0.054	0.994
4	8.27 ± 0.06	0.043	0.996	7.87 ± 0.18	1.897 ± 0.82	0.040	0.998
3	7.73 ± 0.05	0.015	0.998	7.40 ± 0.12	1.526 ± 0.53	0.025	0.999
3–5	8.15 ± 0.05	0.060	0.992	7.67 ± 0.14	2.29 ± 0.62	0.056	0.993
Knudsen range (0.03–0.7)							
5	8.69 ± 0.09	0.179	0.989	7.35 ± 0.20	2.80 ± 0.39	0.123	0.995
4	8.48 ± 0.05	0.093	0.997	7.95 ± 0.15	1.10 ± 0.29	0.079	0.998
3	8.54 ± 0.14	0.200	0.989	7.18 ± 0.29	2.36 ± 0.48	0.140	0.995
3–5	8.58 ± 0.05	0.163	0.991	7.57 ± 0.13	2.02 ± 0.24	0.126	0.995

TABLE 3. Experimental coefficients A_i^{exp} and B_i^{exp} obtained from the polynomial fitting of the first ($i = 1$) or second ($i = 2$) degree, s_r is the squared residual sum, and r is the determination coefficient.

The coefficients A_i^{exp} and B_i^{exp} , obtained by applying the nonlinear least-squares Marquard–Levenberg algorithm to the measured values of the mass flow rate, normalized according to (3.6), are given in table 3. The uncertainty on these coefficients is estimated using the standard error.

As is well known, a second-order effect according to the Knudsen number generally exists in the slip regime and increases when the Knudsen number increases (below one). In order to investigate this question, we compared the pertinence of various fittings, using the linear polynomial form and then the quadratic form defined in (4.1). These comparisons were fulfilled for various partial Knudsen-number ranges and required the introduction of two additional parameters: the determination coefficient r^2 (as given in the software Matlab) and the squared residual sum $s_r = \sqrt{1/(n-p) \sum e_i^2}$ to estimate the quality of the fit; here $e_i = S_i^{exp} - S_{f_i}^{exp}$ is the local difference between the measured and the fitted values, and so represents the local fitting error, n is the number of measurements, p is the number of unknown coefficients in the fitting model. Analysing the values of these two coefficients given in table 3, we find that the determination coefficients r^2 of the first- and second-power fittings are similar when considering the Knudsen-number range 0.03–0.3; but for the widest range under consideration, 0.03–0.7, the determination coefficient of the second-power fitting is closer to 1 than that of the first-power fitting. Moreover, the values of the squared residual sum s_r are similar for the first- and the second-power fitting in the Knudsen-number range 0.03–0.3. However, for the widest Knudsen-number range (0.03–0.7), the values of s_r are always smaller for the second-power fitting. On this basis, in the Knudsen zone 0.03–0.3, the first-power representation gives globally satisfactory results. Thus, in this range, the quadratic fitting is not required in order to obtain a good approximation of the measured values. Moreover, it appears that the measurements are not sufficiently precise to give significant values of the second-power coefficient. On the other hand, considering the uncertainties on the fitting coefficients and the values of the statistical parameters defined above, in the range 0.03–0.7, the second-power shape becomes apparent.

Furthermore, in order to establish the agreement better between the experimental data and the first- and second-power fittings, respectively, we also compared the

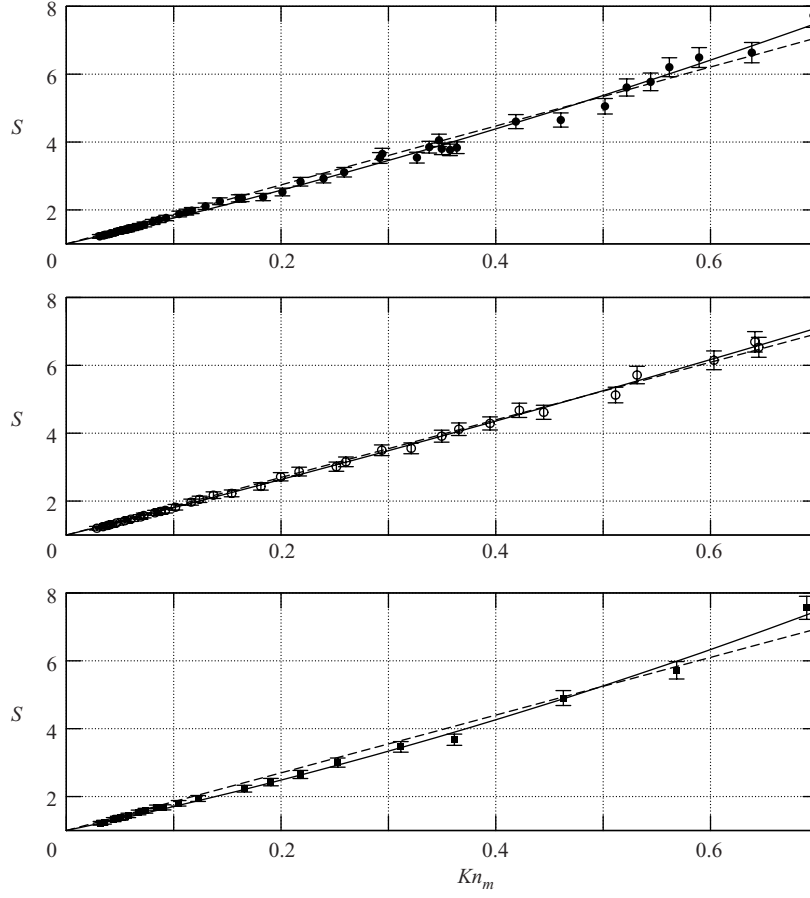


FIGURE 2. Dimensionless mass flow rate obtained according to (3.6). The fitting of the experimental data with the first- (dashed line) and the second- (solid line) power polynomial function. ■, pressure ratio $\mathcal{P} = 3$; ○, 4; ●, 5.

errors on the measurements (estimated 4.5 %) with the standard error on the fit curves $\sqrt{(1/n)\Sigma e_i^2/S_m^{exp}}$, here S_m^{exp} is the averaged value of the measured values. Then, regarding the 0.03–0.3 Knudsen-number range, the standard error on the first- and second-power fittings gives the same value, 3.5 %. For the 0.03–0.7 Knudsen-number range, only the standard error on the second-power fitting remains equal to 3.5 %, whereas that on the first-power fitting increases and becomes higher than the experimental error. Thus, considering this new criterion, we again find good agreement for the first-power fitting in the 0.03–0.3 Knudsen-number range and a pertinent quadratic fitting for the 0.03–0.7 range.

The experimental results are presented in figure 2 in a non-dimensional form according to the left-hand side of (3.6). The fittings of the first power (dashed line) and of the second power (solid line) are also plotted. Figure 2 shows clearly the presence of a slight second-power effect appearing for a mean Knudsen number higher than 0.5, which confirms the analysis given above.

Finally, under the considered conditions (isothermal helium flows in rectangular channels) and in the restricted Knudsen-number range defined above (slip regime and near transitional regime, i.e. $Kn \leq 0.7 < 1$), we can again distinguish two regions.

\mathcal{P}	α	σ_p	$\alpha_{1\%}$	$\sigma_{p1\%}$
Knudsen range (0.03 – 0.3)				
5	0.900 ± 0.005	1.226 ± 0.011	0.895 ± 0.005	1.238 ± 0.011
4	0.903 ± 0.004	1.221 ± 0.009	0.897 ± 0.004	1.233 ± 0.009
3	0.938 ± 0.004	1.142 ± 0.007	0.933 ± 0.004	1.153 ± 0.007
3–5	0.910 ± 0.004	1.204 ± 0.007	0.905 ± 0.004	1.216 ± 0.007

TABLE 4. Experimental tangential momentum accommodation coefficients (α) and slip coefficients σ_p obtained using the first-power fit. The errors in the table derive from the experimental error in A_1^{exp} . Coefficients $\alpha_{1\%}$, $\sigma_{p1\%}$ are the slip and accommodation coefficients calculated taking into account the correction due to the channel finite-width effects (about 1 %) (Sharipov 1999a).

(i) A lower Kn range 0.03–0.3 where the linear fitting appears convenient whereas the quadratic one seems useless and non-significant. Moreover, considering that the corresponding Knudsen values are small enough we have characterized this range as corresponding to hydrodynamic and slip regimes. Thus, we modelled it using the first-order slip continuum model described in § 3.

(ii) A Kn range extending beyond 0.5, and here precisely to 0.7, where, fitting our mass flow rate data, a quadratic behaviour appears clearly according to Kn . Moreover, in this zone, the second-power coefficient becomes significant and largely more precise than all those derived from previous experiments in the same range (Maurer *et al.* 2003).

4.1.1. First-order modelling in the slip regime

According to the above conclusion, about the Knudsen range 0.03–0.3, we compared theoretical (3.6) and experimental (4.1) mass flow rate expressions. Thus, coefficient A_1 may be expressed in the form:

$$A_1 = \frac{\sigma_p}{k_\lambda} = A_1^{exp}/6. \quad (4.2)$$

This gives the experimental estimation of the velocity slip coefficient summarized in table 4. Of course, this coefficient is calculated using the first-power fitting. This coefficient does not depend significantly on the pressure ratio. These values are slightly different from two theoretical predictions of the slip coefficient: $\sigma_p = 1.012$ given by Kogan (1969) and $\sigma_p = 1.016$ given by Albertoni, Cercignani & Gotusso (1963). These coefficient values have been obtained from the kinetic equation BGK model under the assumption of a full accommodation of the molecules at the wall.

As mentioned in § 3, the value of σ_p is affected by the lateral wall influence (Sharipov 1999a). In our case, $H/w = 0.019$, the correction resulting from this influence is about 1 % and we have corrected the value of σ_p in table 4.

Then we compared our results with other experimental results, especially with those concerning the velocity slip measured by Porodnov *et al.* (1974). They assumed a linear dependence of the mass flow rate on the Knudsen-number, which may be justified by the narrow experimental Knudsen-number range (below 0.04) and so they obtained the velocity slip coefficient from volume flow rate measurements using the linear least-squares method. We must take into account that the experimental conditions differ on two other points, which may explain some differences in our respective results. First, the variation of the pressure between the two tanks is much smaller than in our experiments. Moreover, it should be noted that the arrangement of the

surfaces for both experimental studies is not the same. Porodnov *et al.* (1974) used a glass surface with two types of irregular roughness: the first one with an averaged value of roughness $\sim 1\text{--}5\text{ }\mu\text{m}$ (glass), or, in relative value, 1.1–5.6 % of the channel height; and the second one with an averaged roughness $\sim 0.05\text{ }\mu\text{m}$ (smooth glass), or 0.055 % of their channel height. In the present study, we used a silicon surface with a roughness $\leq 20\text{ nm}$, i.e. in relative value, less than 0.2 % of our channel height, which represents an intermediate value ranging between the roughness of the two types of surface used in Porodnov *et al.* (1974). The value obtained for the slip coefficient is between the two values found by Porodnov *et al.* (1974) (see table 5), which confirms that the roughness is an important characteristic parameter of the surface in our measurements, as noted also in Porodnov *et al.* (1974). The nature of the surfaces was also different: glass in Porodnov *et al.* (1974); and silicon in the present work.

Accommodation coefficient. From the experimental estimation of the velocity slip coefficient we also derived the value of the accommodation coefficient using the Maxwell diffuse-scattering model. The use of the usual Maxwell kernel for the gas–surface interaction gives the following value for the velocity slip coefficient, when neglecting the Knudsen-layer influence

$$\sigma_p^M = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{2 - \alpha}{\alpha},$$

where α is the part of the molecules reflected diffusively. Moreover, it is shown using scattering kernel formalism (Cercignani 1990) that α represents also the accommodation coefficient of any kinetic molecule parameter; but establishing σ_p^M , Maxwell (1878) considered α as the accommodation coefficient of the momentum tangential component, since it is usual to confer this meaning on α when used in the slip coefficient expression.

Nevertheless, in the case of a full accommodation, the theoretical coefficient σ_p^M , which does not include the Knudsen-layer correction, is 0.886, which is different from the well-known theoretical diffuse value given in Albertoni *et al.* (1963). Therefore, we report here another method to calculate the accommodation coefficient proposed by Loyalka, Petrellis & Stvorick (1975) taking into account the Knudsen layer influence. They calculated the values of the slip coefficient using the BGK kinetic model and a Maxwellian diffuse-specular scattering kernel over the whole range of values of accommodation coefficient α ; a simple ‘modified’ expression associating the slip coefficient and the accommodation coefficients was proposed:

$$\sigma_p(\alpha) = \frac{2 - \alpha}{\alpha} (\sigma_p(1) - 0.1211(1 - \alpha)), \quad (4.3)$$

where $\sigma_p(1)$ is the slip coefficient for $\alpha = 1$ equal to 1.016, i.e. the value theoretically obtained by Albertoni *et al.* (1963).

Thus, based on (4.3) and on the measured value of the velocity slip coefficient, we can calculate the ‘experimental’ tangential momentum accommodation coefficient α ($\alpha = 0.910$), which is given in table 5 with the accommodation coefficients obtained by other authors. All the measurements quoted in this table were carried out using different experimental techniques, in channels with different surfaces. The results in Colin *et al.* (2004) and Maurer *et al.* (2003) were obtained using the second-power fit and also a larger Knudsen-number range: 0–0.44 in Colin *et al.* (2004) and 0–0.8 in Maurer *et al.* (2003).

We can also estimate the accommodation coefficient using the values obtained numerically, from the BGK kinetic equation in Loyalka (1975), where the mass flow rate is tabulated for a varying coefficient: for our non-dimensional measured values

Coefficient	α	σ_p
Porodnov <i>et al.</i> (1974) ²	0.958 ± 0.005	1.099 ± 0.02
Porodnov <i>et al.</i> (1974) ³	0.862 ± 0.006	1.320 ± 0.01
Colin <i>et al.</i> (2004) ¹	0.998	1.02
Maurer <i>et al.</i> (2003) ¹	0.977 ± 0.03	1.06 ± 0.07
Present results ¹	0.910 ± 0.003	1.204 ± 0.007
Albertoni <i>et al.</i> (1963) ^T	1	1.016

TABLE 5. The tangential momentum accommodation coefficients (α) and the slip coefficient for helium flow (¹silicon, ²glass, ³smooth glass, ^Ttheoretical values). The accommodation coefficient α is calculated from (4.3). The present results correspond to the 0.03–0.3 Knudsen range and averaged for all the pressure ratios used (line (3–5) in table 4).

Coefficient	A_2^{exp}	B_2^{exp}	Kn_m
Maurer <i>et al.</i> (2003)	7.20 ± 0.3	2.76 ± 1.2	$0.06 - 0.8$
Present results	7.57 ± 0.13	2.02 ± 0.24	$0.03 - 0.7$

TABLE 6. The second-power fitting coefficients A_2^{exp} and B_2^{exp} obtained in Maurer *et al.* (2003) and in the present paper.

of mass flow rate, using the table given in Loyalka (1975), we find an accommodation coefficient close to 0.96 (within the 0.03–0.3 Knudsen-number range). We give this evaluation process because we shall use this one exclusively for the accommodation evaluation in the transitional and the free regime (see §4.2). From the previous analysis, we may provisionally conclude that the silicon surface must be described as a quasi-diffuse surface.

4.1.2. Quadratic mass flow rate behaviour

The coefficients of the second-power fitting (A_2^{exp} , B_2^{exp}) are given in table 6. The values found for coefficient B_2^{exp} show that a significant Knudsen second-power influence appears when fitting the mass flow rate in the 0.03–0.7 Knudsen-number range. Within this range, we obtained pertinent values for this second-power coefficient. Similar experimental study of this quadratic form was also performed by Maurer *et al.* (2003) and presented as resulting from the second-order effect. These authors processed a large number of measurements obtained for a Kn_m increasing up to 0.8, i.e. in a Knudsen-number range close to our experimental range (0.03–0.7). They reported that their second-order coefficient B_2^{exp} appears very sensitive to experimental errors. In the present work, these errors are much smaller than those in Maurer *et al.* (2003). In any case, as shown in table 6, the results obtained by Maurer *et al.* (2003) are in good agreement with the present results. Considering the respective uncertainties given in table 6, it is clear that the two results are consistent. Of course, this agreement appears as a positive check of our experimental technique. Moreover, this agreement tends to prove that in plan geometry, the second coefficient B_2^{exp} does not depend significantly on the channel height or on the pressure. In addition, the precision, largely better than in Maurer *et al.* (2003), may be improved using new sensors. Thus, this fitting presents some interest for engineering. Nevertheless, even though done by other authors (Maurer *et al.* 2003; Colin *et al.* 2004), we did not analyse this mass flow rate behaviour in the frame of Navier–Stokes second-order modelling, because

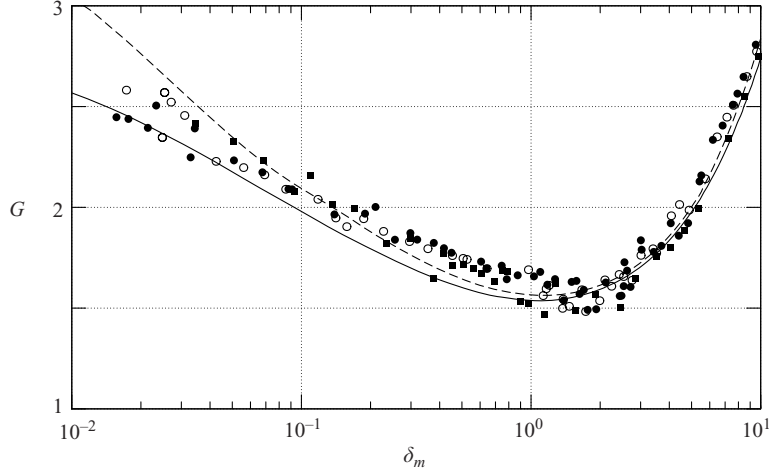


FIGURE 3. Free-molecular scaling of experimental mass flow rate in a channel calculated according to (3.11) with three pressure ratios and theoretical curves: Sharipov (1999a) (full line) rectangular channel $H/w = 0.02$ or Loyalka (1975) parallel plates (dash line). ■, pressure ratio $\mathcal{P} = 3$; ○, 4; ●, 5.

in our investigations we cannot exclude the possibility that high-order components are involved in the result.

4.2. Transitional and free molecular regimes

The measured mass flow rates are given in figure 3 in a non-dimensional form according to (3.11) for pressure ratios $\mathcal{P} = 3, 4$ and 5. The results are plotted as a function of the rarefaction parameter δ_m calculated according to (3.10) using the mean pressure in the channel. The comparison between the results obtained from different pressure ratios sustains the hypothesis that this experimental non-dimensional mass flow rate does not depend much on this parameter, as was previously described in the slip regime.

In order to compare this measured mass flow rate with the available theoretical results, we used the numerical solution of the BGK model equation obtained by Sharipov (1999a) with a diffuse boundary condition for the molecules impinging on the wall in the rectangular channel with $H/w = 0.02$ cross-section. These results are presented in the form of the non-dimensional mass flow rate Q , (3.9), as a function of δ under the assumption of ‘small pressure ratio’. As was mentioned in § 3, we integrated the non-dimensional quantity Q over δ in order to compare with our measurements where the pressure ratio is not close to 1 along the channel. In figure 3, the theoretical mass flow rate obtained after integration (cf. (3.11), (3.12)) is represented as a solid line. In this figure, we also compared our measurements with the results of Loyalka (1975) obtained in the same way for the flows between two parallel plates (dashed line). In the slip regime and at the beginning of the transitional regime, the difference between the mass flow rates from the two theoretical models (parallel plates and channel characterized by a relatively small height/width ratio) is small. However, at the beginning of the free molecular regime ($Kn = 10\text{--}15$ or $\delta = 0.07\text{--}0.1$), a difference appears between the curves of the two theoretical models. The experimental results apparently behave in a surprising way: in fact, along all the transitional regime and up to the near free molecular regime ($0.7 < Kn < 10\text{--}15$, or $1.5 > \delta > 0.1\text{--}0.07$) the measurements seem to be rather closer to the theoretical results derived from

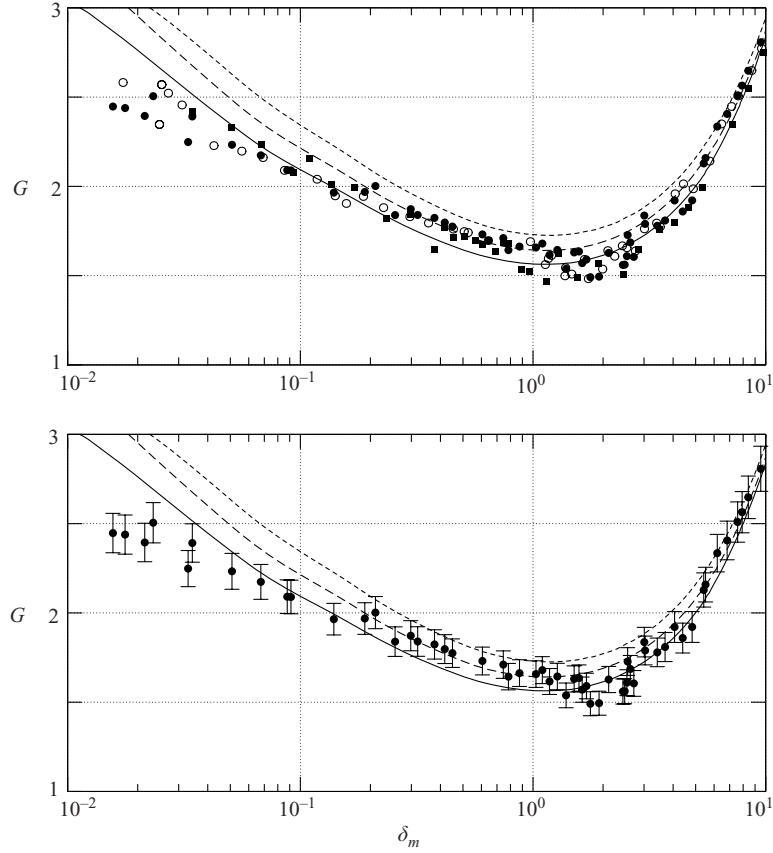


FIGURE 4. Free-molecular scaling of experimental mass flow rate in a channel calculated according to (3.11) with three pressure ratios and theoretical curves (Loyalka 1975) with ---, $\alpha = 0.92$; --, 0.96; —, 1. ■, pressure ratio $\mathcal{P} = 3$; ○, 4; ●, 5.

Loyalka (1975); this probably means that in the transitional regime, the influence of the wall is not yet sufficiently dominant to yield significant differences between the cases $H/w = 0.019$ and $H/w = 0.0$ which corresponds to the theoretical treatment by Loyalka (1975). However, when Kn increases more strongly (δ decreasing strongly) in the full free molecular regime and then when Kn tends to infinity (δ tends to zero) the asymptotic behaviour of the Loyalka (1975) results (parabolic branch) becomes increasingly inappropriate. The measured values (obtained here from $Kn = 15$ up to $Kn = 50$, i.e. $0.01 < \delta < 0.07$) appear increasingly far from the Loyalka solution and close to an asymptotic value predicted by Sharipov (1999a).

Furthermore, in order to evaluate now the influence of the surface structure and roughness (rather than that of the surface shape previously analysed through the aspect ratio), we used the results obtained by Loyalka (1975) with the BGK model and the Maxwellian diffuse-specular reflection on the surface. The corresponding non-dimensional mass flow rates G obtained with the technique described above are presented in figure 4 where different values of the accommodation coefficient, ranging from 0.92 to 1, are tested. This study points out two main features: first, in the Knudsen intermediate range defined above ($0.7 < Kn < 10$ –15, or $1.5 > \delta > 0.1$ –0.07), figure 4 shows that the theoretical model of Loyalka predicts an increasing influence of the

Q_m (kg/s)	P_{in} (Pa)	P_{out} (Pa)	T (°K)	Q_m (kg/s)	P_{in} (Pa)	P_{out} (Pa)	T (°K)
2.11×10^{-9}	109 825	22 633	296.56	5.23×10^{-11}	9691	1962.1	293.45
1.77×10^{-9}	99 285	20 432	296.59	4.89×10^{-11}	9330	1878.0	293.54
1.73×10^{-9}	97 760	19 475	296.59	4.43×10^{-11}	8106	1626.5	293.45
1.62×10^{-9}	94 421	19 057	296.60	3.72×10^{-11}	7383	1468.7	293.53
1.39×10^{-9}	86 676	17 503	296.13	3.40×10^{-11}	6772	1354.9	293.60
1.27×10^{-9}	82 128	16 871	296.79	3.53×10^{-11}	6614.4	1308.49	297.16
1.05×10^{-9}	73 523	14 862	296.00	3.33×10^{-11}	6332.5	1265.41	297.16
9.13×10^{-10}	67 442	13 403	295.93	3.35×10^{-11}	6133.5	1228.23	297.16
8.70×10^{-10}	65 709	13 230.8	295.89	3.17×10^{-11}	5831.2	1184.31	297.15
8.18×10^{-10}	63 360	12 805.9	295.88	2.78×10^{-11}	5398.6	1078.08	297.17
7.57×10^{-10}	60 485	12 345.3	295.82	2.72×10^{-11}	4952.0	989.72	297.16
7.55×10^{-10}	60 632	12 197.3	295.78	2.48×10^{-11}	4588.5	913.48	297.17
6.74×10^{-10}	56 471	11 376.1	295.74	2.40×10^{-11}	4267.3	854.60	297.16
6.36×10^{-10}	54 568	11 164.3	296.84	2.24×10^{-11}	4019.8	788.44	297.15
6.05×10^{-10}	52 949	10 743.3	295.71	1.89×10^{-11}	3404.8	680.68	297.15
5.54×10^{-10}	49 977	10 059.8	295.71	1.66×10^{-11}	3042.5	619.29	297.14
5.05×10^{-10}	47 100	9458.3	295.71	1.65×10^{-11}	2897.3	582.72	297.13
4.33×10^{-10}	42 730	8569.9	296.58	1.35×10^{-11}	2348.9	480.42	297.11
3.91×10^{-10}	39 901	8002.1	296.59	1.04×10^{-11}	1752.6	352.00	297.24
3.46×10^{-10}	36 932	7456.8	296.66	9.74×10^{-12}	1624.7	327.42	297.46
2.91×10^{-10}	32 763	6494.8	296.68	8.97×10^{-12}	1469.1	292.49	297.21
2.64×10^{-10}	30 787	6159.4	296.78	7.64×10^{-12}	1242.8	248.85	297.19
2.47×10^{-10}	29 430	5916.6	296.89	7.24×10^{-12}	1159.6	234.29	297.33
2.14×10^{-10}	26 571	5302.5	296.97	6.14×10^{-12}	996.0	196.85	297.20
1.87×10^{-10}	24 041	4869.7	297.08	5.43×10^{-12}	815.8	166.41	297.21
1.54×10^{-10}	21 421	4328.8	297.14	4.83×10^{-12}	736.4	148.64	297.53
1.49×10^{-10}	21 025	4276.7	297.17	3.53×10^{-12}	534.78	107.070	293.71
1.19×10^{-10}	18 580	3774.7	294.85	2.43×10^{-12}	348.33	71.585	293.71
1.05×10^{-10}	16 914	3456.6	295.01	2.37×10^{-12}	339.24	68.922	295.88
1.01×10^{-10}	15 677	3136.8	295.25	1.90×10^{-12}	261.65	52.635	295.88
8.60×10^{-11}	14 218	2889.5	294.92	1.48×10^{-12}	197.14	39.016	295.81
7.85×10^{-11}	13 194	2662.8	295.24	1.07×10^{-12}	132.13	26.106	293.73
6.97×10^{-11}	11 669	2385.2	295.25	9.47×10^{-13}	127.02	26.342	296.45
7.13×10^{-11}	11 595	2337.7	295.05	7.66×10^{-13}	90.62	17.626	295.69
5.62×10^{-11}	10 456	2101.3	295.01	6.62×10^{-13}	82.95	16.850	296.25
5.67×10^{-11}	10 065	2052.8	294.74	5.59×10^{-13}	68.32	13.642	295.65
5.67×10^{-11}	9819	1988.5	294.88	4.94×10^{-13}	60.39	12.208	295.41
5.00×10^{-11}	9548	1912.7	294.75				

TABLE 7. Parameters and results characterizing the experiment conditions for $\mathcal{P} = 5$.

T1

accommodation coefficient changes, when the Knudsen number increases. Moreover, according to previous comments on the aspect ratio, in the transitional range, the gas behaves first according to Loyalka (1975) (with $\alpha < 1$) and only then (for a near free molecular regime) does it behave according to Sharipov (1999), where $\alpha = 1$. Thus, it seems that when the rarefaction increases, i.e. when there are relatively more gas/wall collisions than gas/gas collisions, the increase of the boundary-condition effects on the flow operates first through the accommodation phenomenon and only then, through the surface aspect ratio. Secondly, a good agreement of measurements and Loyalka calculations is found for $\alpha = 0.96$, better than for $\alpha = 1$, in the δ range from 0.1 to 1 (corresponding to the transitional regime). This result confirms that a full accommodation on the surface is inappropriate in the transitional range as well as

in the slip regime: moreover, it seems also to indicate, at least in the helium isothermal case, that when the same theoretical frame is applied to analyse experimental results, the same accommodation coefficient (of tangential momentum) is found in the slip and transitional regimes. Globally, the comparison of theory and experiments is satisfactory, if we consider that the experimental measurements are not free from errors and that the finite width of the channel section certainly influences the mass flow rate for very high Knudsen numbers. Therefore, for a more accurate analysis of the combined effects of the partial accommodation and of the non-infinite rectangular section of the channel, it would have been interesting to compare the measurements with theoretical models taking into account both the channel aspect ratio and a diffuse-specular reflection. However, this kind of theoretical result cannot be found in the literature.

5. Conclusions

A technique devoted to the measurement of gas mass flow rates in microchannels is implemented, for isothermal helium flows. A wide Knudsen-number range, from the continuum slip regime to the near free molecular regime, is explored. The errors and uncertainties of the experimental method are accurately investigated and estimated. By analysing the fitting parameters, the pertinence of the first-order velocity slip conditions is shown in the 0.03–0.3 Knudsen range. The accommodation coefficient calculated using the classical Maxwell reflection law associated with the continuum approach, is slightly different (about 5 % smaller) from that deduced from the kinetic approach used by Loyalka (1975). However, both coefficients are smaller than 1, which confirms that the accommodation of helium gas on a silica surface is not completely diffuse. Then, a quadratic form was proposed for the mass flow rate in the 0.03–0.7 Knudsen-number range, possibly useful in engineering.

Then the measured values of the mass flow rate are compared with the corresponding values given by theoretical kinetic approaches over almost all the Knudsen range, especially in the transitional and near free molecular regimes. This comparison is globally satisfactory. The difference between the theoretical curves obtained from the BGK equation for parallel plates and for rectangular channels, respectively, becomes apparent immediately when reaching the transitional regime. However, considering the measurements, the aspect ratio influence becomes significant only from the free molecular regime: then in this regime, even in our case where the aspect ratio of the channel (height/width) is relatively small (0.019), it is necessary to take the lateral wall influence into account.

To deduce the accommodation coefficient in the transitional regime (and possibly in the free molecular regime) only the kinetic method used by Loyalka (1975) (BGK model associated with a Maxwell reflection law) was available. Thus, according to this approach, the influence of the accommodation coefficient (on the mass flow rate) also increases immediately when reaching the transitional regime. Of course, this was not controlled experimentally because it would have required the testing of the helium gas on different surfaces (or at least testing various gases in the same channel) which will be the objective of a future study. Nevertheless, when the Knudsen number increases, the increase of the wall influence on the measurements occurs first (i.e. in the transitional regime) through the accommodation process and then (in the free molecular regime) through the aspect ratio influence. Moreover, using the kinetic analysis of Loyalka in both transitional and continuum slip regimes we obtain, from experiments, a similar value for the accommodation coefficient, i.e. (as previously

seen) a value slightly different from that derived in the slip regime using continuum modelling.

The authors are grateful to the CNRS (National Center of Scientific Research – project number MI2F03-45), the Conseil Régional Provence Alpes Côte d’Azur, the SERES and the RS2N company (Recherche Scientifique et Simulation Numerique, 47 Bd Rabatau, F-13008 Marseille) for their financial support. We should also like to acknowledge Felix Sharipov for valuable discussions.

REFERENCES

- ALBERTONI, S., CERCIGNANI, C. & GOTUSSO, L. 1963 Numerical evaluation of the slip coefficient. *Phys. Fluids* **6**, 993–996.
- ARKILIC, E. B., SCHMIDT, M. A. & BREUER, K. S. 1997 Gaseous slip flow in long microchannels. *J. Microelectromech. syst.* **6**(2), 167–178.
- ARKILIC, E., BREUER, K. & SCHMIDT, M. 2001 Mass flow and tangential momentum accommodation in silicon micromachined channels. *J. Fluid Mech.* **437**, 29–43.
- CERCIGNANI, C. 1964 Higher order slip according to the linearized Boltzmann equation. Institute of Engineering Res. Rep. AS-64-19, University of California, Berkeley.
- CERCIGNANI, C. 1990 *Mathematical Methods in Kinetic Theory*. Plenum.
- CERCIGNANI, C. & DANERI, A. 1963 Flow of a rarefied gas between two parallel plates. *Phys. Fluids* **6**, 993–996.
- CHAPMAN, S. & COWLING, T. G. 1970 *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*, 3rd edn. Cambridge University Press.
- COLIN, S., LALONDE, P. & CAEN, R. 2004 Validation of a second-order slip flow model in rectangular microchannels. *Heat Transfer Engng* **25**(3), 23–30.
- DEISSLER, R. G. 1964 An analysis of second-order slip flow and temperature-jump boundary conditions for rarefied gases. *Intl J. Heat Mass Transfer* **7**, 681–694.
- DONG, W. 1956 *University of California Rep.* UCRL-3353. Q1
- EWART, T., PERRIER, P., GRAUR, I. A. & MEOLANS, J. G. 2006 Mass flow rate measurements in gas micro flows. *Exps. Fluids* **41**, 487–498.
- GRAUR, I. A., MEOLANS, J. G. & ZEITOUN, D. E. 2006 Analytical and numerical description for isothermal gas flows in microchannels. *Microfluid. Nanofluid.* **2**, 64–77.
- HARLEY, J., HUANG, Y., BAU, H. & ZEMEL, J. 1995 Gas flows in microchannels. *J. Fluid Mech.* **284**, 257–274.
- HICKEY, K. A. & LOYALKA, S. K. 1990 *J. Vac. Sci. Technol. A* **8**, 957. Q2
- KARNIADAKIS, G. E. & BESKOK, A. 2002 *Microflows: Fundamentals and Simulation*. Springer.
- KOGAN, M. N. 1969 *Rarefied Gas Dynamics*. Plenum.
- LOYALKA, S. K. 1975 Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effects II. *J. Chem. Phys.* **63**, 4054.
- LOYALKA, S. K., PETRELLIS, N. & STVORICK, S. T. 1975 *J. Phys. Fluids* **18**, 1094. Q2
- LOYALKA, S. K., STVORIK, T. S. & PARK, H. S. 1976 Poiseuille flow and thermal creep flow in long, rectangular channels in the molecular and transition flow regimes, *J. Vac. Sci. Technol.* **13**, N6, 1188.
- MAXWELL, J. C. 1878 On stress in rarified gases arising from inequalities of temperature. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* **170**, 231–256.
- MAURER, J., TABELIN, P., JOSEPH, P. & WILLAIME, H. 2003 Second-order slip laws in microchannels for helium and nitrogen. *Phys. Fluids* **15**, 2613–2621.
- OHWADA, T., SONE, Y. & AOKI, K. 1989 Numerical analysis of the Poiseuille and thermal transpiration flows between two parallel plates on the basis of the Boltzmann equation for hard sphere molecules. *Phys. Fluids A* **1**(12), 2042–2049.
- PONG, K., HO, C., LIU, J. & TAI, Y. 1994 Non-linear pressure distribution in uniform microchannels. In *Application of Microfabrication to Fluid Mechanics ASME, FED* **197**, 51–56.
- PORODNOV, B. T., SUETIN, P. E., BORISOV, S. F. & AKINSHIN, V. D. 1974 Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels. *J. Fluid Mech.* **64**, 417–437.

- SHARIPOV, F. 1999*a* Rarefied gas flow through a long rectangular channel. *J. Vac. Sci. Technol. A* **17**, N 5, 3062–3066.
- SHARIPOV, F. 1999*b* Non-isothermal gas flow through rectangular channels. *J. Micromech. Microengng* **9**, 394–401.
- SHARIPOV, F. & SELEZNEV, V. 1998 Data on internal rarefied gas flows. *J. Phys. Chem. Ref. Data* **27**(3), 657–709.
- SUETIN, P. E., PORODNOV, B. T., CHERNJAK, V. G. & BORISOV, S. F. 1973 Poiseuille flow at arbitrary Knudsen numbers and tangential momentum accommodation. *J. Fluid Mech.* **60**, 585–592.
- TISON, S. A. 1993 Experimental data and theoretical modeling of gas flows through metal capillary leaks. *Vacuum* **44**, 1171–1175.
- ZOHAR, Y., LEE, S. Y. K., LEE, W. Y., JIANG, L. & TONG, P. 2002 Subsonic gas flow in a straight and uniform microchannel. *J. Fluid Mech.* **472**, 125–151.

Bibliographie

- AKL, S.G. (2004). Superlinear performance in real-time parallel computation. *The Journal of Supercomputing*, **29**, 89–111. [55](#)
- ALBERTONI, S., CERCIGNANI, C. & GOTUSSO, L. (1963). Numerical evaluation of the slip coefficient. *Phys. Fluids*, **6**. [31](#), [72](#), [104](#)
- ALEXEENKO, A.A., GIMELSHEIN, S.F. & LEVIN, D.A. (2003). Reconsideration of flows through constriction microchannels using the dsmc method. In *Proceedings of the 33rd AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit*, American Institute of Aeronautics and Astronautics. [53](#)
- AOYAMA, Y. & NAKANO, J. (1999). Rs/6000 sp : Practical mpi programming. Tech. Rep. SG24-5380-00, IBM Corp. [46](#)
- ARKILIC, E.B., SCHMIDT, M.A. & BREUER, K.S. (1997). Gaseous slip flow in long microchannels. *Journal Microelectomech Systeme*, **6**, 167–178. [14](#), [74](#)
- ARKILIC, E.B., BREUER, K.S. & SCHMIDT, M.A. (2001). Mass flow and tangential momentum accomodation in silicon micromachined channels. *Journal of fluid mechanics*, **437**, 29–43. [14](#)
- BARBER, R.W. & EMERSON, D.E. (2005). Challenges in modeling gas-phase flow in microchannels : from slip to transition. In *Proceedings of ICMM2005, 3rd international conference on microchannels and minichannels, Toronto*, 13–15. [32](#)
- BIRD, G.A. (1994). *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford Science Publications. [29](#), [32](#), [40](#), [41](#), [42](#), [47](#), [51](#), [52](#), [58](#)
- BRUN, R. (1986). *Tansport et relaxation dans les écoulements gazeux*. Masson. [27](#), [29](#)
- CERCIGNANI, C. (1964). Higher order slip according to the linearized boltzmann equation. In *Insitute of Engineering Research Report AS-64-19*, University of Caliornia, Berkeley. [29](#), [31](#), [65](#), [67](#), [72](#), [73](#), [110](#)
- CERCIGNANI, C. (1990). *Mathematical methods in kinetic theory*. Plenum Press New York. [31](#), [73](#), [85](#), [105](#)

BIBLIOGRAPHIE

- CERCIGNANI, C. & DANERI, A. (1963). Flow of a rarefied gas between two parallel plates. *Phys. Fluids*, **6**, 34, 37, 67, 97, 110
- CERCIGNANI, C. & LAMPIS, M. (1971). Kinetic model for gas-surface interaction. *Transp. Theory and Stat. Phys.*, **1**, 42
- CERCIGNANI, C. & PAGANI, C.D. (1967). Variational approach to rarefied flows in cylindrical and spherical geometry. In N.Y. Academic, ed., *Rarefied gas dynamics*, vol. 1, 555–573. 34
- CERCIGNANI, C. & SERNAGIOTTO, F. (1966). Cylindrical couette flow of a rarefied gas. *Phys. Fluids*, **10**, 1200–1204. 34
- CHAPMAN, S. & COWLING, T.G. (1970). *The mathematical theory of non-uniform gases*. University Press, Cambridge. 29, 32
- COLIN, S. (2004). Rarefaction and compressibility effects on steady and transient gas flows in microchannels. *Microfluidics and Nanofluidics*, **1**, 268–279. 31
- COLIN, S., LALONDE, P. & CAEN, R. (2004). Validation of a second-order slip flow model in rectangular microchannel. *Heat Transf Eng*, **25**, 23–30. 14, 74, 97
- DADZIE, K. & MÉOLANS, J.G. (2004). Anisotropic scattering kernel : generalized and modified maxwell boundary conditions. *J. of Math. Phys.*, **45**, 1804–1819. 42
- DEISSLER, R.G. (1964). An analysis of second-order slpi flow and temperature-jump boundary conditions for rarefied gases. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **7**, 681–694. 31, 73
- DIETRICH, S. & BOYD, I.D. (1996). Scalar and parallel optimized implementation of the direct simulation monte carlo method. *Journal of Computational Physics*, **126**, 328–342. 41
- DONG, W. (1956). Uclrl-3353. Tech. rep., Unversity of California. 11
- EWART, T., PERRIER, P., GRAUR, I. & MÉOLANS, J.G. (2006). Mass flow rate measurements in gas micro flows. *Experiments in Fluids*, **41**, 487–498. 33, 35
- EWART, T., PERRIER, P., GRAUR, I. & MÉOLANS, J.G. (2007a). Mass flow rate measurements in microchannel, from hydrodynamic to near free molecular regimes. *Journal of fluid mechanics*. 35
- EWART, T., PERRIER, P., GRAUR, I. & MÉOLANS, J.G. (2007b). Tangential momentum accomodation in microtube. *Microfluidics and Nanofluidics*. 35, 73
- FISCHER, D. (1991). On superlinear speedups. *Parallel computing*, **17**, 695–697. 55
- GARDNER, M. (1970). The fantastic combinations of john conway’s new solitaire game «life». *Scientific American*, **223**. 40

- GRAOUR, I., MÉOLANS, J.G. & ZEITOUN, D. (2006). Analytical and numerical description for isothermal gas flows in microchannels. *Microfluidics and Nanofluidics*, **2**, 30, 32
- GUYON, E., HULIN, J.P. & PETIT, L. (1994). *Hydrodynamique physique*. InterEdition/ Editions du CNRS. 27
- HADJICONSTANTINO, N. (2003). Comment on cercignani's second-order slip coefficient. *Phys. Fluids*, **15**, 257–274. 32
- HARLEY, J., HUANG, Y., BAU, H. & ZEMEL, J. (1995). Gas flows in microchannels. *Journal of fluid mechanics*, **284**, 257–274. 13, 66
- HICKEY, K.A. & LOYALKA, S.K. (1990). Plane poiseuille flow : Rigid sphere gas. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **8**, 957. 35
- INFICON (2003). <http://www.inficonvacuumgauges.com/en/cdg025c.html>. Tech. rep., Inficon. 16
- JANG, J. & WERELEY, S. (2004). Pressure distributions of gaseous slip flow in straight and uniform rectangular microchannels. *Microfluidics and Nanofluidics*, **1**, 13
- JITSCHIN, W. & RÖHL, P. (1987). Quantitative study of the thermal transpiration effect in vacuum gauges. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **5**, 372–375. 25
- KARNIADAKIS, G.E. & BESKOK, A. (2002). *Microflows : Fundamentals and Simulation*. Springer. 9, 32
- KOGAN, M.N. (1969). *Rarefied gas dynamics*. Plenum Press New York. 31, 72
- LALONDE, P. (2001). *Etude expérimentale d'écoulements gazeux dans les micro-systèmes à fluides*. Ph.D. thesis, Institut National des Sciences appliquées de Toulouse. 14, 66
- LANG, H. & LOYALKA, S.K. (1984). Some analytical results for thermal transpiration and the mechanocaloric effect in a cylindrical tube. *Phys. Fluids*, **27**, 1616–1619. 32
- LENGRAND, J., ELIZAROVA, T. & SHIROKOV, I. (2006). Calcul de l'écoulement visqueux compressible d'un gaz dans un microcanal. *La houille Blanche*, 40–46. 103
- LO, S.S. & LOYALKA, S.K. (1982). An efficient computation of near continuum rarefied gasflows. *J. Appl. Math. and Phys.*, **33**, 34, 35
- LO, S.S., LOYALKA, S.K. & STVORIK, T.S. (1984). Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effect. v. flow of polyatomic gases in a cylindrical tube with arbitrary accommodation at the surface. *J. Chem. Phys.*, **81**, 2439. 34
- LOYALKA, S.K. (1975). Kinetic theory of thermal transpiration and mechanocaloric effects. *J. Chem. Phys.*, **II**, 4054. 31, 36, 97, 99, 100, 101, 102, 106, 110

BIBLIOGRAPHIE

- LOYALKA, S.K., PETRELLIS, N. & STVORICK, S.T. (1975). Some numerical results for the bgk model : thermal creep and viscous slip problems with arbitrary accommodation at the surface. *Phys. Fluids*, **18**, 1091–1099. [34](#), [35](#)
- LOYALKA, S.K., STVORIK, T.S. & PARK, H.S. (1976). Poiseuille flow and thermal creep flow in long, rectangular channels in the molecular and transition flow regimes. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **13**, 1188. [34](#), [35](#), [36](#), [37](#), [102](#)
- MAURER, J., TABELING, P., JOSEPH, P. & WILLAIME, H. (2003). Second-order slip laws in microchannels for helium and nitrogen. *Phys. Fluids*, **15**, 2613–2621. [14](#), [67](#), [73](#), [74](#), [94](#), [97](#), [98](#)
- MAXWELL, J. (1878). On stress in rarified gases arising from inequalities of temperature. *Philosophical Transactions of the royal society of London*, **170**, 231–256. [30](#), [42](#), [51](#), [104](#)
- MÉOLANS, J.G. & DADZIE, K. (2005). Scattering kernel for polyatomic molecules. *Journal of Matematical Physics*, **46**. [42](#)
- MILEWSKI, B. (2001). *C++ In Action Industrial-Strength Programming Techniques*. Addison-Wesley. [42](#), [45](#)
- NANCE, R.P., HASH, D. & HASSAN, H.A. (1997). Role of boundary conditions in monte carlo simulation of mems devices. *J. Thermophys. Heat Transf.*, 497. [53](#)
- OHWADA, T., SONE, Y. & AOKI, K. (1989). Numerical analysis of the poiseuille and thermal transpiration flows between two parallel plates on the basis of the boltzmann equation for hard-sphere molecules. *Phys. Fluids*, **A**, 2042–2049. [35](#), [59](#), [61](#), [62](#), [112](#)
- OPENMP (2002). Openmp c and c++ application program interface. Tech. rep., OpenMP Architecture Review Board. [55](#)
- PIEKOS, E.S. & BREUER, K.S. (1996). Numerical modeling of micromechanical devices using the direct simulation monte carlo method. *Journal of Fluids Engineering*, **118**, 464–469. [56](#)
- PONG, K., HO, C., LIU, J. & TAI, Y. (1994). Non-linear pressure distribution in uniform microchannels. In A. FED, ed., *Application of microfabrication to fluid mechanics*, vol. 197, 51–56. [13](#), [14](#)
- PORODNOV, B.T. & TUCHVETOV, F. (1979). Theoretical investigation in non-isothermal flow of rarefied gas in a cylindrical capillary. *J. Eng. Phys.*, **36**, 61. [11](#), [34](#), [35](#), [36](#), [74](#), [87](#), [89](#), [90](#), [101](#), [110](#)
- PORODNOV, B.T. & TUCHVETOV, F.T. (1978). *Izv. Akad. Nauk SSSR. Mekh. Zhid. Gaza*, **6**. [34](#)

- PORODNOV, B.T., SUETIN, P.E., BORISOV, S.F. & AKINSHIN, V.D. (1974). Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels. *Journal of fluid mechanics*, **64**, 417–437. [11](#), [14](#), [96](#), [97](#)
- POULTER, K.C., RODGERS, M.J., NASH, P.J., THOMPSON, T.J. & PERKIN, M.P. (1983). Thermal transpiration correction in capacitance manometers. *Vacuum*, **33**, 331–316. [25](#)
- SHARIPOV, F. (1996). Rarefied gas flow through a long tube at any temperature ratio. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **14**, 2627–2635. [34](#), [35](#)
- SHARIPOV, F. (1999a). Non-isothermal gas flow through a long rectangular channels. *J. Micromech. Microeng*, **9**, 394–401. [34](#), [35](#), [36](#)
- SHARIPOV, F. (1999b). Rarefied gas flow through a long rectangular channel. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **17**, 3062–3066. [32](#), [34](#), [35](#), [36](#), [37](#), [98](#), [99](#), [100](#), [101](#), [102](#), [106](#), [110](#), [111](#)
- SHARIPOV, F. & BERTOLDO, G. (2005). Rarefied gas flow through a long tube of variable radius. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **23**, 531–533. [34](#), [35](#)
- SHARIPOV, F. & SELEZNEV, V. (1998). Data on international rarefied gas flows. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **27**, 657–709. [32](#), [34](#), [35](#), [36](#), [37](#), [87](#)
- SHEN, C., FAN, J. & XIE, C. (2003). Statistical simulation of rarefied gas flows in micro-channel. *Journal of Computational Physics*, **189**. [56](#)
- SONE, Y. (2006). *Molecular Gas Dynamics*. Birkhäuser. [73](#)
- STROUSTRUP, B. (1991). *The C++ Programming Language*. Addison-Wesley. [42](#)
- SUN, Q. & BOYD, I.D. (2002). A direct simulation method for subsonic, microscale gas flows. *Journal of Computational Physics*, **179**, 400–425. [41](#)
- TISON, S.A. (1993). Experimental data and theoretical modeling of gas flows through metal capillary leaks. *Vacuum*, **44**, 1171–1175. [11](#)
- WANG, M. & LI, Z. (2004). Simulations of gas flows in microgeometries using the direct simulation monte carlo method. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, **25**, 975–985. [41](#)
- WELANDER, P. (1954). On the temperature jump in rarefied gas. *Arkiv för Fysik*, **7**, 507. [31](#)
- WU, J.S. & TSENG, K.C. (2001). Analysis of micro-scale gas flows with pressure boundaries using direct simulation monte carlo method. *Computers and fluids*, **30**. [41](#), [53](#)

BIBLIOGRAPHIE

- XUE, H., FAN, Q. & SHU, C. (2000). Prediction of micro-channel flows using direct simulation monte carlo. *Probabilistic engineering mechanics*, **15**, 213–219. [41](#)
- YAO, Z., HE, F., SHEN, M. & WANG, X. (2004). Low-speed gas flow subchoking phenomenon in long-constant-area microchannel. *AIAA Journal*, **42**, 1517–1521. [13](#)
- ZOHAR, Y., LEE, S.Y.K., LEE, W.Y., JIANG, L. & TONG, P. (2002). Subsonic gas flow in a straight and uniform microchannel. *Journal of fluid mechanics*, **472**, 125–151. [14](#)

Résumé - Cette thèse aborde le problème de l'interaction gaz/paroi et des conditions aux limites en écoulement de gaz raréfié. Ce travail de thèse porte sur l'étude expérimentale, numérique et théorique des écoulements isothermes dans les microtubes et les microcanaux pour différents gaz. Le volet proprement expérimental porte sur la mesure des débits. Ce volet est complété d'abord par la mise en oeuvre d'une méthode de Monte Carlo permettant d'atteindre le profil des vitesses dans des sections choisies. Ces résultats sont comparés à ceux donnés par différentes approches théoriques et numériques : approche NS continue en régime de glissement, approches cinétiques (Boltzmann linéarisé, BGK) en régime transitionnel ou en régime moléculaire libre. A travers ces comparaisons on détermine notamment le domaine de validité du régime de glissement (premier et second ordre), des valeurs du coefficient d'accommodation de la composante tangentielle de la quantité de mouvement, les valeurs du coefficient du second ordre en régime de glissement ainsi que les grandeurs dont il dépend. On analyse aussi le comportement asymptotique de l'écoulement (débit) quand le nombre de Knudsen devient très grand.

Mots-clés : Débit massique, conditions aux limites de glissement, coefficient d'accommodation, théorie cinétique des gaz, Monte Carlo, couche de Knudsen.

Abstract - This Ph. D work involves experimental, numerical and theoretical studies on the isothermal flows in the microtubes and the microchannels using different gases. The experimental part is devoted to the measurements of the mass flow rates. It is completed by a numerical simulation based on the Monte Carlo method, that gives the velocity profile in a section of the microdevice. The results were compared to the following approaches : the NS equations in the slip regime and the various kinetic approaches (linearized Boltzmann equation, BGK) in the transitional and the free molecular regime. Comparing our experiments to these numerical or theoretical approaches , we determine the field of validity of the slip regime (using first and second order boundary conditions), the values of the tangential accommodation coefficient, the values of the coefficient of second order and its parameter dependences. Finally, we analyze the asymptotic behavior of the mass flow rate in the free molecular regime.

Keywords : Mass flow rate, slip boundary conditions, accommodation coefficient, Monte Carlo, Knudsen layer.